

EINE NEUE, ALLGEMEIN ANWENDBARE METHODE ZUR
BESTIMMUNG DER ELEKTRONISCHEN STRUKTUR VON
SYSTEMEN MIT PLANARER TRANSLATIONSSYMMETRIE

Dissertation
der Fakultät für Physik
der
Ludwig-Maximilians-Universität
München

vorgelegt von
GERHARD WACHUTKA
aus München

München, den 28. Juni 1985



Digitized by the Internet Archive
in 2026

Eine neue, allgemein anwendbare Methode zur
Bestimmung der elektronischen Struktur von
Systemen mit planarer Translationssymmetrie

Dissertation
der Fakultät für Physik
der
Ludwig-Maximilians-Universität
München

vorgelegt von
Gerhard Wachutka
aus München

München, den 28. Juni 1985

1. Gutachter : Prof. Dr. H. Bross

2. Gutachter : Prof. Dr. H. Kalf

Tag der mündlichen Prüfung : 20.9.1985

Zusammenfassung

Es wird ein allgemeines Schema entwickelt, das sowohl für eine abstrakte analytische wie auch für eine konkrete numerische Bestimmung der elektronischen Struktur von räumlich ausgedehnten zweidimensional-periodischen physikalischen Systemen geeignet ist. Da weder die Schichtanzahl noch die Form des Potentials einer wesentlichen Beschränkung unterliegt, umfaßt der Bereich der möglichen Anwendungen sehr verschiedenartige Systeme wie Schichtkristalle, dünne Schichten, reale Oberflächen, Adsorbatsysteme, Metall-Halbleiter-Übergänge oder auch planare Defektphänomene. Weil bei derartigen Strukturen vielfach kristalline Halbräume involviert sind, wird der Behandlung der hierdurch verursachten Implikationen breiter Raum gewidmet.

Charakteristisch für die dargestellte Methode ist, daß zunächst jede Einzelschicht des jeweils betrachteten Systems durch einen Greenschen Operator repräsentiert wird und dann durch Verknüpfung dieser Operatoren die gesamte Struktur synthetisiert wird. Hierbei gewinnt man unter anderem einen Zugang zur komplexen Bandstruktur und zur Zustandsdichte einer Kristalloberfläche; ferner wird auf natürliche Weise eine klare Klassifikation elektronischer Halbraumzustände geboten.

Die numerische Praktikabilität des Verfahrens wird anhand von Modellrechnungen an Al- und Cu-Halbräumen demonstriert.

Inhaltsverzeichnis

	Seite
Zusammenfassung	1
Einheiten und Konstanten	6
1. Einführung	7
2. Eine Klasse stabiler Parametrisierungen des Lösungsraumes der elektronischen Wellenfunktionen einer Einzelschicht	
2.1 Formulierung des Randwertproblems für die Einzelschicht	14
2.1.1 Reduktion des Problems auf die Elementarsäule	14
2.1.2 Der $\wedge$ - Operator	20
2.2 Heuristische Betrachtung des Einzelschichtproblems	27
2.2.1 Transformation auf Evolutionsform	27
2.2.2 Kritik an der Propagatormethode	29
2.2.3 Die korrekten Randdaten	35
2.3 Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität von Lösungen des Einzelschichtproblems	39
2.3.1 Schwache Lösungen	39
2.3.2 Starke Lösungen	44
2.3.3 Charakterisierung der Lösungen durch eine Variationsaufgabe	52
2.3.4 Approximative Lösungen	55
2.4 Weitere Eigenschaften des Spektrums des Einzelschicht-Hamilton-operators	60
2.4.1 Die Abhängigkeit der Energieeigenwerte von $\wedge_\alpha$	60
2.4.2 Zusammenhang mit der reellen Bandstruktur (Einschließungseigenschaft)	68
3. Der Greensche Operator einer Einzelschicht als fundamentale Größe für Schichtstrukturen	
3.1 Die Berechnung verallgemeinerter Blochlösungen ("komplexe Bandstruktur")	74
3.1.1 Definition und Charakterisierung verallgemeinerter Blochlösungen	74

	Seite
3.1.2 Zur gruppentheoretischen Klassifikation verallgemeinerter Blochlösungen	76
3.1.3 Die Schichtstreumatrix und das lineare Eigenwertproblem zur Bestimmung verallgemeinerter Blochlösungen	86
3.1.4 Adjungiertheits- und Orthogonalitätseigenschaften (Stromerhaltung)	91
3.1.5 Einige Eigenschaften konsistenter Approximationen	97
3.1.6 Eine kritische Anmerkung zur LTM-Methode	100
3.2 Die Synthese von Schichtstrukturen	102
3.2.1 Herleitung der Schichtverknüpfungsgleichungen	102
3.2.2 Die Iteration elementarer Schichtfolgen ('Layer Doubling')	105
3.2.3 Das asymptotische Verhalten des Reflexions- und Transmissionsoperators (Stromsummenregel)	107
3.3 Die Konstruktion der Gesamtlösung aus den asymptotischen Randvorgaben	120
3.3.1 Die Behandlung des Außenraumes eines kristallinen Halbraumes	120
3.3.2 Die Anschlußbedingungen	122
3.3.3 Zur gruppentheoretischen Klassifikation der Lösungen des Gesamtproblems	125
4. Die Dichte der durch eine Oberfläche gebundenen elektronischen Zustände von Schichtstrukturen	
4.1 Klassifikation der gebundenen Zustände	128
4.1.1 Oberflächenadaptierte Volumenzustände	128
4.1.2 Oberflächenzustände und -resonanzen	129
4.2 Der Begriff der Oberflächenzustandsdichte	131
4.2.1 Das Maß im Phasenraum (Stromnormierung)	131
4.2.2 Die Definition der Oberflächenzustandsdichte und ihr Bezug zur Ladungsneutralität	136
4.3 Zur konkreten Berechnung der Oberflächenzustandsdichte	139
4.3.1 Die integrierte Oberflächenzustandsdichte	139
4.3.2 Der Grenzübergang zum Halbraum	142

	Seite
5. Eine numerische Realisierung in Form eines APW-artigen Verfahrens	
5.1 Die Diskretisierung des Einzelschicht-Randwertproblems	147
5.1.1 Die variationelle Formulierung	147
5.1.2 Die spezielle Wahl der Ansatzfunktionen	149
5.1.3 Die Bestimmungsgleichungen für die Entwicklungs- koeffizienten	151
5.1.4 Die Behandlung der vom Potential unabhängigen Matrixelemente	153
5.1.5 Die potentialabhängigen Matrixelemente	156
5.1.6 Vereinfachungen durch den Einfluß der Kristallsymmetrie	158
5.1.7 Numerische Details	160
5.2 Das algebraische Eigenwertproblem für die komplexe Bandstruktur	161
5.2.1 Die planare Fourierdarstellung der Schichtstreu­matrix	161
5.2.2 Konditions- und Konvergenzeigenschaften	162
5.3 Die numerische Behandlung des Halbraumproblems	165
5.3.1 Die Schichtsynthese	165
5.3.2 Die Bestimmung gebundener Halbraumzustände	166
6. Numerische Ergebnisse von Modellrechnungen an den Metallen Al und Cu	
6.1 Das Modell für den Halbraum	172
6.1.1 Das Potential im Volumenbereich	172
6.1.2 Das Potential im Außenraum	173
6.2 Komplexe Bandstrukturen	174
6.2.1 Untersuchungen zur Konvergenz und Optimierung der freien Parameter des Verfahrens	174
6.2.2 Erläuterungen zu den berechneten komplexen Bandstrukturen	180
6.2.3 Kritischer Vergleich mit dem CMAPW-Verfahren	184
6.3 Oberflächenzustände	187
6.3.1 Untersuchungen zur numerischen Lokalisierbarkeit und zur Abhängigkeit vom Außenraumpotential	187
6.3.2 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen	191

Anhänge

	Seite
A1. Beweis der Friedrichschen Ungleichung (2.32)	193
A2. Charakterisierung des energetischen Raumes $H_t^{(1)}(Z)$	195
A3. Charakterisierung der Sobolevräume $H_t^{(s)}(Z)$	196
A4. Nachweis der Voraussetzungen für die schwache Lösbarkeit des Einzelschichtproblems und Charakterisierung der schwachen Lösungen	214
A5. Die Realisierung des Einzelschichtproblems im Hilbertraum $L_2(\Omega)$ (starke Lösungen)	224
A6. Zur Konvergenz der approximativen Lösungen	237
A7. Zur α -Abhängigkeit der Spektren des Einzelschichtproblems	242
A8. Ableitung der Stromsummenregel	246
Literaturverzeichnis	250
Lexikon der verwendeten Symbole	259

Einheiten und Konstanten

In dieser Arbeit werden atomare Maßeinheiten verwendet:

$$\text{Längeneinheit : } a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529171 \text{ \AA}$$

$$\text{Energieeinheit: } E_0 = \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2} = 1 \text{ Ry} = 13.6058 \text{ eV}$$

In diesen Einheiten besitzen die Naturkonstanten die folgenden Maßzahlen:

$$\hbar = 1 ; \quad e^2 = 2 ; \quad m_e = \frac{1}{2}$$

Bei den numerischen Rechnungen wurde als Gitterkonstante zugrunde gelegt:

$$a = 6.83087 \text{ a.u. für Cu}$$

$$a = 7.65287 \text{ a.u. für Al}$$

1. Einführung

Die vorliegende Arbeit handelt von der Analysis und numerischen Berechenbarkeit elektronischer Zustände in physikalischen Systemen mit planarer Translationssymmetrie. Beispiele für solche räumlich ausgedehnte zweidimensional-periodische Strukturen finden sich in der Festkörperphysik in reicher Zahl; darunter fallen halbseitig unendlich ausgedehnte kristalline Festkörper mit unter Umständen relaxierten und rekonstruierten reinen Oberflächen (/1,pp.2-3/) ebenso wie z.B. durch Chemisorption aus Substrat und Adsorbat gebildete Adsorbatsysteme (/1,ch.6;/2/) oder wie (einige Atomlagen umfassende) dünne Schichten, aber auch Schichtstrukturen, die durch die periodische Wiederholung einer meist kompliziert strukturierten Folge elementarer Schichten entstehen (/3/). Nicht zu vergessen sind hier auch Systeme, die aus zwei halbseitig unendlich ausgedehnten Festkörpern mit einer gemeinsamen ebenen Grenzfläche bestehen; hierunter fallen z.B. Metall-Halbleiter-Übergänge (/4,ch.4.5/), aber auch Defektphänomene wie der Stapelfehler (/5/).

Obgleich bereits in den dreissiger Jahren, als die Ideen der jung entwickelten Quantenmechanik in der Festkörperphysik Eingang gefunden hatten, erste theoretische Arbeiten über elektronische Zustände in Kristallen mit Oberflächen erschienen (/6;/168;/7/), begann die intensive theoretische Beschäftigung mit der Physik der Oberflächen und dünnen Schichten erst drei Jahrzehnte später, etwa mit den grundlegenden Arbeiten von Forstmann, Heine und Pendry (/8;/9;/10;/11;/12;/13/). Die rasante Entwicklung neuer experimenteller Techniken mit immer höherer Auflösung - man denke nur an die elektronenspektroskopischen Methoden wie die Streuung niederenergetischer Elektronen (LEED) (/14/), die Augerelektronenspektroskopie (AES) (/15/), die Energieverlustspektroskopie (ELS) (/16/), die winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie (ARUPS) (/17;/18/) oder die winkelaufgelöste Bremsstrahlungsisochromatenspektroskopie (ARUBIS) (/19/) - lieferte eine reichhaltige Palette zuverlässiger experimenteller Daten von zweidimensional-periodischen Strukturen, die nach einer qualitativen Interpretation im Rahmen theoretischer Modelle und einer quantitativen Bestätigung durch numerische Rechnungen verlangten. Es war naheliegend, aus der Theorie des in drei Dimensionen unendlich ausgedehnten Festkörpers ("Bulk") bekannte Begriffe wie "Blochwelle", "Bandstruktur" oder

"lokale Zustandsdichte" möglichst zwanglos auf Systeme mit nur noch planarer Translationssymmetrie zu übertragen, wobei zwei konzeptionell verschiedene Wege beschritten wurden, die sich in einer entsprechenden Unterteilung der bis heute entwickelten numerischen Verfahren in zwei Gruppen widerspiegeln:

Die erste Gruppe umfaßt die Gesamtschichtverfahren, bei denen simultan für eine aus endlich vielen Schichten bestehende Struktur die Schrödingergleichung näherungsweise gelöst wird, indem die elektronischen Wellenfunktionen ψ durch Linearkombinationen von Ansatzfunktionen $\varphi_{j,\vec{k}_n}$ approximiert werden, die parallel zu den Ebenen zweidimensionaler Periodizität eine Blochbedingung mit planarem Ausbreitungsvektor $\vec{k}_n$ erfüllen und senkrecht zu diesen Ebenen einen physikalisch sinnvollen asymptotischen Verlauf besitzen. Als Ansatzfunktionen dienen - nach entsprechender Modifikation für den Fall zweidimensionaler Translationssymmetrie - meist solche, deren Verwendung sich bei der Berechnung der elektronischen Struktur des Bulks als erfolgreich erwiesen hat, wie z.B.

- Linearkombinationen von Atomorbitalen (LCAO) (/20;/21/)
- Linearkombinationen von Gauß-Orbitalen (LGO) (/22;/23;/24/)
- Linearkombinationen von Muffin-Tin-Orbitalen (LMT0) (/25;/26;/27/)
- "Augmented Plane Waves" (LAPW) (/26;/28;/29/).

All diesen Verfahren ist gemeinsam, daß die Zahl der Ansatzfunktionen und damit die Dimension des resultierenden algebraischen Eigenwertproblems proportional zur Zahl der Schichten ist; selbst auf modernen Großrechenanlagen lassen sich daher mit einem Gesamtschichtverfahren nur Strukturen behandeln, die eine relativ kleine Zahl von Atomlagen (typischerweise 10-20 Schichten) umfassen. Insbesondere ist die Anwendung dieser Methoden auf Fragestellungen, die kristalline Halbräume involvieren, sehr problematisch, da die Extrapolation der numerischen Ergebnisse weniger Schichten auf den Limes unendlich vieler manche Tücken aufweist: So ist oft schwer zu entscheiden, ob eine Wellenfunktion ins Kristallinnere exponentiell abfällt, also als Oberflächenzustand oder Oberflächenresonanz zu interpretieren ist, oder ob sie eine Linearkombination propagierender Blochwellen darstellt, deren Blochcharakter an der Oberfläche durch eben deren

Einfluß mehr oder weniger stark verzerrt ist (/4,pp.281-285/). Ähnlich problematisch gestaltet sich die Interpretation des Energiespektrums: Während im Falle des halbseitig unendlich ausgedehnten Festkörpers zu jedem planaren Ausbreitungsvektor $\vec{k}_{||}$ die Energiewerte der im Kristall propagierenden elektronischen Zustände und der Oberflächenresonanzen einen Satz kontinuierlicher Intervalle bilden (die "projizierte Bandstruktur") und allenfalls in den verbleibenden Energielücken zu Oberflächenzuständen gehörende diskrete Energiewerte sich befinden können (siehe Kap. 4), erhält man im Falle endlich vieler Schichten nur diskrete Energien, deren Anzahl proportional zur Zahl der Schichten ist und die aus Symmetriegründen meist zu fast entarteten Paaren verschiedener Parität angeordnet sind. Beim Grenzübergang zum Halbraum verdichten sich dann fast alle diskreten Energien zu quasikontinuierlichen Intervallen und die Fastentartung wird aufgehoben. Mit Hilfe der in dieser Arbeit beschriebenen Methode läßt sich zeigen, daß die für eine hinreichende Approximation des Halbraums nötige Schichtanzahl von der Energie der betrachteten elektronischen Zustände abhängt; in der Umgebung einzelner Energiewerte, insbesondere an den Randpunkten der Energieintervalle der projizierten Bandstruktur, ist die Konvergenz sehr langsam und man erzielt erst mit 2^9 - 2^{10} Schichten Halbraumverhältnisse, während dies in anderen Energiebereichen schon mit 2^4 - 2^5 Schichten gelingt.

Die prinzipielle Beschränkung der Anwendbarkeit auf nur dünne Schichten ist bei der zweiten Gruppe, den Einzelschichtverfahren, nicht gegeben. Bei diesen bestimmt man zunächst zu vorgegebenen Werten von Energie und planarem Ausbreitungsvektor $(E, \vec{k}_{||})$ für jede einzelne Schicht $z_L \leq z \leq z_R$ (z bezeichnet die Koordinate in der Richtung senkrecht zu den Ebenen planarer Translationssymmetrie) die Mannigfaltigkeit der Lösungen $\psi_{E, \vec{k}_{||}}$ der Schrödingergleichung. Die Wellenfunktionen $\psi_{E, \vec{k}_{||}}$ werden hierbei dadurch eindeutig charakterisiert, daß sie an den Randflächen $z = z_L$ und $z = z_R$ gewisse inhomogene lineare Randbedingungen erfüllen; die Randdaten werden dabei willkürlich als freie Parameter vorgegeben und erst im weiteren Verlauf der Rechnung eindeutig festgelegt.

Bei den in der Literatur dargestellten Verfahren werden zwei Typen von Randvorgaben benutzt:

i) Einpunkt-Randbedingungen der Form

$$(1.1) \quad \psi(\vec{r}_n, z_L) = b_0(\vec{r}_n) \quad \text{und} \quad \partial_n \psi(\vec{r}_n, z_L) = b_1(\vec{r}_n)$$

ii) Zweipunkt-Randbedingungen der Form

$$(1.2) \quad \begin{aligned} \Delta \psi(\vec{r}_n, z_R) + \partial_n \psi(\vec{r}_n, z_R) &= b_R(\vec{r}_n) \quad \text{und} \\ \Delta \psi(\vec{r}_n, z_L) + \partial_n \psi(\vec{r}_n, z_L) &= b_L(\vec{r}_n); \end{aligned}$$

hier bezeichnet $\vec{r}_n$ die Koordinaten parallel zu den Ebenen planarer Translationssymmetrie, $\partial_n = (\vec{n} \cdot \vec{e}_z) \frac{\partial}{\partial z}$ die Ableitung in Richtung der äußeren Normale auf den Randflächen $z = z_R$ bzw. $z = z_L$ und Δ einen positiven Operator, der auf die Funktionen $\psi(., z_R)$ bzw. $\psi(., z_L)$ wirkt. Die allgemeine Lösung $\psi_{E, \vec{k}_n}$ wird in beiden Fällen durch eine lineare Abbildung $b \rightarrow \psi_{E, \vec{k}_n}$ gemäß

$$(1.3) \quad \psi_{E, \vec{k}_n}(., z) = P_{E, \vec{k}_n}^{(00)}(z, z_L) b_0 + P_{E, \vec{k}_n}^{(01)}(z, z_L) b_1 \quad ; \quad z_L \leq z \leq z_R$$

bei Vorgabe der Randbedingung (1.1) bzw.

$$(1.4) \quad \psi_{E, \vec{k}_n}(., z) = G_{E, \vec{k}_n}(z, z_R) b_R + G_{E, \vec{k}_n}(z, z_L) b_L \quad ; \quad z_L \leq z \leq z_R$$

bei Vorgabe der Randbedingung (1.2) vermittelt.

Die Lösungen der Schrödingergleichung für die gesamte Schichtstruktur erhält man, indem man durch Verknüpfung der Matrizen von Operatoren

$$(1.5) \quad P_{E, \vec{k}_n} := \begin{pmatrix} P_{E, \vec{k}_n}^{(00)}(z_R, z_L), & P_{E, \vec{k}_n}^{(01)}(z_R, z_L) \\ P_{E, \vec{k}_n}^{(10)}(z_R, z_L), & P_{E, \vec{k}_n}^{(11)}(z_R, z_L) \end{pmatrix}$$

$$\text{mit} \quad P_{E, \vec{k}_n}^{(1\alpha)}(z, z_L) := \partial_z P_{E, \vec{k}_n}^{(0\alpha)}(z, z_L) \quad (\alpha = 0, 1)$$

bzw.

$$(1.6) \quad G_{E, \vec{k}_n} := \begin{pmatrix} G_{E, \vec{k}_n}^{RR} & G_{E, \vec{k}_n}^{RL} \\ G_{E, \vec{k}_n}^{LR} & G_{E, \vec{k}_n}^{LL} \end{pmatrix}$$

$$\text{mit} \quad G_{E, \vec{k}_n}^{XY} := G_{E, \vec{k}_n}(z_X, z_Y) \quad (X, Y \in \{R, L\})$$

für je zwei aufeinanderfolgende Schichten A und B die entsprechende Matrix für die kombinierte Schicht A+B gewinnt. Im Falle der Zweipunkt-Randbedingung beinhalten diese Verknüpfungsgleichungen relativ aufwendige Rechenoperationen (siehe Abschnitt 3.2), während im Falle der Einpunkt-Randbedingung die Schichtverknüpfung einfach durch eine Matrizenmultiplikation

$$(1.7) \quad P_{E, \vec{k}_n}^{(A+B)} = P_{E, \vec{k}_n}^{(B)} \cdot P_{E, \vec{k}_n}^{(A)}$$

geleistet wird. Durch wiederholte Anwendung dieser Verknüpfungsgleichungen lassen sich beliebig viele Schichten (d.h. auch Halbräume) synthetisieren. Der letzte Schritt bei den Einzelschichtverfahren besteht dann darin, vermöge der resultierenden P- bzw. G- Matrizen die aus der physikalischen Aufgabenstellung als bekannt vorauszusetzende asymptotische Form der Wellenfunktion $\psi_{E, \vec{k}_n}$ bei $z \rightarrow +\infty$ mit der bei $z \rightarrow -\infty$ in Form eines linearen Gleichungssystems in Beziehung zu setzen; dessen Lösungen definieren dann die elektronischen Zustände der gesamten Schichtstruktur zu $(E, \vec{k}_n)$.

Die einfache Form der Verknüpfungsgleichung (1.7) und - vermutlich auf mathematischen Mißverständnissen beruhende - vermeintliche Analogien zwischen der Theorie gewöhnlicher linearer Differentialgleichungen und der partieller elliptischer Differentialgleichungen sind wohl der Grund dafür, daß bei der Formulierung zweier miteinander in engem Zusammenhang stehender Methoden zur Lösung des Einzelschichtproblems, der Ausbreitungsmatrixmethode (/30/; /31/; /32/) und der Transfermatrixmethode (/33/; /31/; /34/), die Einpunkt-Randbedingung (1.1) zugrunde gelegt wurde. Schienen erste numerische Rechnungen an einfachen Metallen (/32/; /35/) die praktische Anwendbarkeit dieser Verfahren zu untermauern, so verzeichnete der Autor dieser Arbeit beim Versuch, mit einer erweiterten Version der kritiklos

akzeptierten Ausbreitungsmatrixmethode das Übergangsmetall Kupfer zu behandeln, numerische Instabilitäten und unüberwindliche Konvergenzprobleme (/36/); ähnliche Beobachtungen machten zur selben Zeit Holzwarth und Lee (/37/), welche die Ursache für die mangelnde Konvergenz der Transfermatrixmethode in der bereits auf Laue (/38/) zurückgehenden "gemischten Darstellung" der Wellenfunktion als planare Fourierreihe sahen - ein interessanter Punkt, der durchaus der Erörterung bedarf (siehe Abschnitt 5.2.2). Die wesentliche und bei der bisherigen Diskussion offenbar völlig übersehene Tatsache ist jedoch, daß jedes Verfahren, welches auf der Vorgabe eines Randdatums gemäß Gleichung (1.1) basiert, eine mathematisch inkorrekte Problemstellung impliziert, was eine sehr empfindliche (d.h. instabile) Abhängigkeit der Wellenfunktionen $\psi_{E, \mathbf{k}_\parallel}$ von den Randwerten (b_0, b_1) zur Konsequenz hat (/39/) und daher solche Verfahren für numerische Zwecke völlig ungeeignet macht (siehe Abschnitt 2.2).

Hingegen führen Randbedingungen der Form (1.2), wie die Betrachtungen im 2. Kapitel dieser Arbeit zeigen, auf ein mathematisch korrektes Problem; das hierauf beruhende, in den Kapiteln 3, 4 und 5 dargestellte Verfahren erwies sich daher auch bei den im 6. Kapitel beschriebenen Modellrechnungen an Aluminium und Kupfer als numerisch stabil, wobei - der Komplexität der elektronischen Struktur entsprechend - beim einfachen Metall Aluminium eine erheblich größere Konvergenzgeschwindigkeit festzustellen ist als beim Übergangsmetall Kupfer. Bei der numerischen Realisation dieser Methode fanden bei der Darstellung der Wellenfunktion dem APW-Verfahren (/40/) und bei der Formulierung der Schichtverknüpfung dem Layer-KKR-Verfahren (/41;/42;/43/) verwandte Ideen Eingang. Letzteres, eine ebenfalls auf Randbedingungen vom Typ (1.2) (/41, equ.31-33/) aufbauende Greensfunktionsmethode, wurde erfolgreich als Grundlage für LEED-Rechnungen (/44;/45/) verwendet und diente wohl auch als Vorbild für eine erst unlängst veröffentlichte, hierzu ähnliche Methode, die als Basis zur Berechnung winkelaufgelöster Photoemissionsspektren entwickelt wurde (/46/). Während die zuletzt genannten Verfahren jedoch mit der Einschränkung behaftet sind, daß nur formbeschränkte Potentiale mit einfacher z-Abhängigkeit außerhalb und sogenannter Muffin-Tin-Form innerhalb der Kristallstruktur behandelt werden können - wobei die Muffin-Tin-Gestalt des Potentials

eine wesentliche Voraussetzung ist, ohne die die Layer-KKR-Methode überhaupt nicht formuliert werden kann - und allenfalls kleine Abweichungen von dieser Gestalt störungstheoretisch berücksichtigt werden können (/47/), unterliegt das hier beschriebene Verfahren prinzipiell nicht solchen Beschränkungen. Nichtsdestoweniger reduziert die Verwendung formbeschränkter Potentiale natürlich auch hier den Rechenaufwand beträchtlich; da die vom Autor durchgeführten Modellrechnungen in erster Linie als Test für die numerische Anwendbarkeit der entwickelten Methode (d.h. für Stabilitäts- und Konvergenzuntersuchungen) dienen sollten und hierzu die Vergleichsmöglichkeit mit den Ergebnissen früherer, auf anderen Verfahren basierender Rechnungen geboten sein sollte, denen Muffin-Tin-Potentiale zugrunde liegen, wurden die erstellten Computerprogramme für Potentiale der sogenannten Warped-Muffin-Tin-Form konzipiert.

2. Eine Klasse stabiler Parametrisierungen des Lösungsraumes der elektronischen Wellenfunktionen einer Einzelschicht

2.1 Formulierung des Randwertproblems für die Einzelschicht

2.1.1 Reduktion des Problems auf die Elementarsäule

Unter einer Einzelschicht verstehen wir den räumlichen Bereich

$\mathcal{V} = \mathbb{R}^2 \times (z_L, z_R)$ zusammen mit einem hierauf definierten (lokalen) Ein-
teilchenpotential $w(\vec{r}_\parallel, z)$, welches bezüglich eines planaren Translations-
gitters $G_2 = \mathbb{Z} \vec{a}_1 \oplus \mathbb{Z} \vec{a}_2$ (/48, S.31 ff./) zweidimensionale Periodizität
besitzt:

$$(2.1) \quad w(\vec{r}_\parallel + \vec{R}, z) = w(\vec{r}_\parallel, z) \quad \text{für } \vec{R} \in G_2, (\vec{r}_\parallel, z) \in \mathcal{V}$$

Die elektronischen Wellenfunktionen zur Energie $E \in \mathbb{R}$ genügen in $\mathcal{V}$ der
Schrödingergleichung

$$(2.2) \quad (-\Delta + w - E)\psi = 0$$

und lassen sich wegen der planaren Translationssymmetrie des (formalen)
Operators $-\Delta + w$ nach den irreduziblen Darstellungen der Translations-
gruppe G_2 (/49/)

$$(2.3) \quad G_2 \ni \vec{R} \mapsto \exp(i\vec{k}_\parallel \vec{R}) \in U(1)$$

klassifizieren, indem man sie der planaren Blochbedingung

$$(2.4) \quad \psi(\vec{r}_\parallel + \vec{R}, z) = e^{i\vec{k}_\parallel \vec{R}} \psi(\vec{r}_\parallel, z) \quad \text{für } \vec{R} \in G_2, (\vec{r}_\parallel, z) \in \mathcal{V}$$

mit einem Ausbreitungsvektor $\vec{k}_\parallel$ aus der (zweidimensionalen) ersten
Brillouinzone $\bar{BZ}_1$ (/48, S.87/) unterwirft. Um die Wellenfunktionen ein-
deutig festlegen zu können, benötigt man noch weitere Randbedingungen an
den Randflächen $z = z_R$ und $z = z_L$; aus den in der Einführung genannten
Gründen wählen wir hierzu Randvorgaben vom Typ (1.2), die man in Analogie

zum sogenannten Newtonschen Gesetz in der Wärmeleitungstheorie (/50/) "verallgemeinerte Newtonsche Randbedingung" oder auch "verallgemeinerte Ausstrahlungsbedingung" nennen könnte. Damit diese mit der Blochbedingung (2.4) kompatibel ist, müssen den Randdaten b_R und b_L gewisse Einschränkungen auferlegt werden. Wenn man sich auf den Fall beschränkt, daß für alle $\vec{R} \in G_2$ die Translationsoperatoren

$$(2.5) \quad T(\vec{R}) : \psi \mapsto T(\vec{R})\psi \text{ mit } T(\vec{R})\psi(\vec{r}_s, z) := \psi(\vec{r}_s - \vec{R}, z)$$

mit dem Operator $\mathcal{A}$ vertauschen, sind die Bedingungen (1.2) und (2.4) genau dann verträglich, wenn auch b_R und b_L die Blochbedingung (2.4) erfüllen, sodaß die Funktionen b_R bzw. b_L bei Kenntnis ihrer Werte auf irgendeiner Elementarzelle Z des Gitters G_2 (z.B. der zweidimensionalen Wigner-Seitz-Zelle WSZ_2 (/48, S.28/)) vermöge Gl. (2.4) bereits auf der gesamten Randfläche $z = z_R$ bzw. $z = z_L$ vollständig bestimmt sind. Ebenso ist durch die Funktionswerte der auf die Elementarsäule

$$(2.6) \quad \Omega := Z \times (z_L, z_R)$$

eingeschränkten Wellenfunktion ψ diese bereits auf der Einzelschicht $\mathcal{V}$ vollständig festgelegt. Daher ist es möglich und zweckmäßig, die Lösung des Einzelschichtproblems in folgender Weise auf die Lösung eines äquivalenten Randwertproblems auf Ω zurückzuführen:

Der Rand der Elementarzelle Z sei dargestellt als die bis auf die Eckpunkte disjunkte Vereinigung ihrer paarweise parallelen Kanten

$\Gamma_{k,0}$ und $\Gamma_{k,1}$ ($k = 1, \dots, M$):

$$(2.7) \quad \partial Z = \Gamma_0 \cup \Gamma_1 \text{ mit } \Gamma_j = \bigcup_{k=1}^M \Gamma_{k,j},$$

wobei $\Gamma_{k,0}$ durch Parallelverschiebung um den zweidimensionalen Gittervektor $\vec{T}_k \in G_2$ aus $\Gamma_{k,1}$ hervorgeht:

$$(2.8) \quad \Gamma_{k,0} = \vec{T}_k + \Gamma_{k,1}$$

(siehe Fig. 2.1.a)

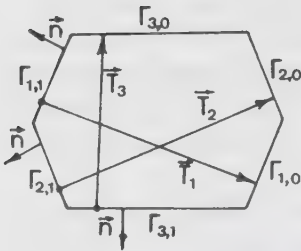


Fig. 2.1.a:
Rand der Elementarzelle Z

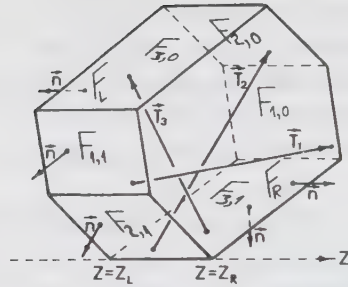


Fig. 2.1.b:
Rand der Elementarsäule

Dies induziert eine entsprechende Zerlegung des Randes der Elementarsäule Ω (siehe Fig. 2.1.b) ¹⁾:

$$(2.9) \quad \partial\Omega = F_L \cup F_R \cup \bigcup_{k=1}^M (F_{k,0} \cup F_{k,1})$$

mit

$$(2.10) \quad F_L := Z \times \{z_L\} ; F_R := Z \times \{z_R\} ; F_{k,j} := T_{k,j} \times [z_L, z_R] ,$$

wobei wiederum $F_{k,0}$ zu $F_{k,1}$ parallel ist:

$$(2.11) \quad F_{k,0} = \vec{T}_k + F_{k,1}$$

Die Vereinigung von Randflächen $\bigcup_{k=1}^M F_{k,1}$ heie S_t . Im Hinblick auf eine kompakte Formulierung der Randbedingungen ist es zweckmig, fr Funktionen $\psi \in \mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega})$ ²⁾ und $\alpha = 0,1$ die Kurzschreibweisen

1) Die Bezeichnungsweise lehnt sich eng an die Darstellung in /51/ an, die das hier behandelte Randwertproblem als spezielle Anwendung einschliet.

2) $\mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega})$ ist die Menge der in Ω beliebig oft differenzierbaren Funktionen, die zusammen mit all ihren Ableitungen auf den Abschlu $\bar{\Omega}$ stetig fortsetzbar sind.

$$(2.12) \quad \partial_n^\alpha \psi_1(\vec{r}) := \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} (\vec{n}(\vec{r}) \vec{\nabla})^\alpha \psi(\vec{r}') \quad \text{für } \vec{r} \in S_t$$

$$(2.13) \quad \partial_n^\alpha \psi_0(\vec{r}) := \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r} + \vec{T}_k} (\vec{n}(\vec{r}) \vec{\nabla})^\alpha \psi(\vec{r}') \quad \text{für } \vec{r} \in F_{k,1} \text{ und} \\ F_{k,0} = \vec{T}_k + F_{k,1}$$

$$(2.14) \quad \partial_n^\alpha \psi_X(\vec{r}) := \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} (\vec{n}(\vec{r}) \vec{\nabla})^\alpha \psi(\vec{r}') \quad \text{für } \vec{r} \in F_X \quad (X = R, L)$$

einzuführen; hierbei ist $\vec{n}(\vec{r})$ die (bezüglich des Lebesgueschen Oberflächenmaßes σ) fast überall auf $\partial\Omega$ existierende äußere Normale von Ω . Definiert man schließlich noch die "Übertragungsfunktion"

$$(2.15) \quad t: S_t \rightarrow \mathbb{C}, \quad t(\vec{r}) := e^{i\vec{k}_t \cdot \vec{T}_j} \quad \text{für } \vec{r} \in F_{j,1},$$

so lautet das auf die Elementarsäule Ω reduzierte Randwertproblem nunmehr:

Gegeben seien $(E, \vec{k}_0) \in \mathbb{R} \times \mathbb{B}\mathbb{Z}_1$ und Randdaten

$b_X: F_X \rightarrow \mathbb{C} \quad (X = R, L)$ mit der Eigenschaft

$$(2.16) \quad b_X(\vec{r} + \vec{T}_k) = t(\vec{r}) b_X(\vec{r}) \quad \text{für } \vec{r} \in T_{k,1} \times \{z_X\}; \quad (X = R, L).$$

Gesucht ist eine Wellenfunktion ψ , welche die Schrödingergleichung (2.2) in Ω erfüllt und den Gl.(1.2) und (2.4) entsprechenden Randbedingungen

$$(2.17) \quad \Delta \psi_X + \partial_n \psi_X = b_X \quad \text{auf } F_X \quad (X = R, L)$$

$$(2.18) \quad \partial_n^\alpha \psi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \psi_1 \quad \text{auf } S_t \quad (\alpha = 0, 1)$$

genügen.

Die vorstehende Formulierung bedarf natürlich hinsichtlich der Regularitätseigenschaften der Funktionen ψ und b_X noch einiger Präzisierungen, womit eng die Frage verknüpft ist, in welchem Sinne die Schrödingergleichung (2.2) und die Randbedingungen (2.17) und (2.18) erfüllt sein sollen;

es ist beispielsweise nicht sinnvoll, letztere als punktweise Gleichheit von Funktionswerten zu verstehen, da die Funktionen $\partial_n^\alpha \psi_X$, $\partial_n^\alpha \psi_j$ und t nur bis auf $\mathcal{G}$ -Nullmengen (die Kanten von $\partial\Omega$) definiert sind. Um eine korrekte Problemstellung (/52, Vol. II, Kap. III, § 7.2;/53, ch. 25;/58, Vol. II, Appendix/) sicherzustellen, ist ein Paar (V, H_F) von normierten Funktionenräumen anzugeben, das folgenden Bedingungen genügt:

- (K1) Zu $b = (b_R, b_L) \in H_F$ existiert genau eine Lösung $\psi_b \in V$ des (reduzierten) Einzelschichtproblems, d.h. die Regularitätseigenschaften der Randdaten müssen die eindeutige Existenz einer mit dazu passenden Regularitätseigenschaften versehenen Lösung implizieren.
- (K2) H_F und V sind vollständig, d.h. werden b bzw. ψ durch Folgen approximiert, so darf deren Limes nicht H_F bzw. V verlassen.
- (K3) Die Zuordnung $b \mapsto \psi_b$ definiert eine stetige lineare Abbildung $H_F \rightarrow V$, d.h. wird b durch eine Folge (b_n) approximiert, so auch ψ_b durch die Bildfolge (ψ_n) .
- (K4) Es gibt normierte Funktionenräume $H_{FX}^{(\alpha)}$ bzw. $H_{St}^{(\alpha)}$ ($\alpha = 0, 1$; $X = R, L$), sodaß $V \ni \psi \mapsto \partial_n^\alpha \psi_X \in H_{FX}^{(\alpha)}$ bzw. $V \ni \psi \mapsto \partial_n^\alpha \psi_j \in H_{St}^{(\alpha)}$ stetige Fortsetzungen der zunächst nur auf $\mathcal{C}^\infty(\overline{\Omega})$ definierten Abbildungen sind, d.h. eine ψ approximierende Folge (ψ_n) behält ihre Approximationseigenschaft auch bezüglich der Randbedingungen bei.
- (K5) Der Operator $\mathcal{A}$ ist auf $H_{FX}^{(0)}$ definiert mit Werten in $H_{FX}^{(1)}$, d.h. die Randbedingung (2.17) ist als Gleichung in $H_{FX}^{(1)}$ zu verstehen.

Die Konstruktion der zur Erfüllung der vorstehenden Bedingungen erforderlichen Räume und Operatoren ist in den folgenden Abschnitten dargestellt; an dieser Stelle sollen nur einige Grundbegriffe bereitgestellt werden und die Bedingung (K4) näher betrachtet werden:

Für $p \geq 1$ bezeichne $L_p(\Omega)$ den Banachraum der Funktionen $f: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$,

deren p-te Potenz $|f|^p$ integrabel ist, versehen mit der üblichen Norm

$$\|f\|_{L_p(\Omega)} := \|f\|_p := \left(\int_{\Omega} |f|^p d^3r \right)^{1/p}.$$

Des weiteren sei $W_2^{(k)}(\Omega)$ der Sobolevraum der Funktionen $\psi \in L_2(\Omega)$, deren verallgemeinerte Ableitungen (/53, ch.2/)

$$(2.19) \quad D^{\alpha} \psi := \frac{\partial^{|\alpha|} \psi}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \partial x_3^{\alpha_3}}$$

für jeden Multiindex $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ mit $|\alpha| := \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \leq k$ im Raum $L_2(\Omega)$ liegen; mit dem Skalarprodukt

$$(2.20) \quad (\chi | \varphi)_{k, \Omega} := \sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\Omega} D^{\alpha} \chi^* D^{\alpha} \varphi d^3r$$

ist $W_2^{(k)}(\Omega)$ ein Hilbertraum. Durch Ersetzen des Volumenmaßes d^3r durch das Oberflächenmaß dg erhält man für G -meßbare Teilmengen $S \subset \partial\Omega$ in analoger Weise die Räume $L_p(S)$ und $W_2^{(k)}(S)$ (/54, ch.2, §4/).

Die Funktionen aus $W_2^{(k)}(\Omega)$ besitzen die wichtige Eigenschaft, daß ihnen und ihren verallgemeinerten Ableitungen bis zur Ordnung $k-1$ "vernünftige" Randwerte auf $\partial\Omega$ zugeordnet werden können; dies geschieht auf folgende Weise: Der Unterraum $C^{\infty}(\bar{\Omega})$ liegt dicht in $W_2^{(k)}(\Omega)$ (hierfür ist wesentlich, daß die Elementarsäule Ω einen hinreichend glatten Rand besitzt, siehe z.B. /54, p.67/ oder /55, thm.2.2/) und die Abbildungen

$$(2.21) \quad C^{\infty}(\bar{\Omega}) \ni \psi \mapsto \partial_n^{\alpha} \psi_j \in L_2(S_j) \quad (\alpha = 0, \dots, k-1; j = 0, 1)$$

$$(2.22) \quad C^{\infty}(\bar{\Omega}) \ni \psi \mapsto \partial_n^{\alpha} \psi_{\chi} \in L_2(F_{\chi}) \quad (\alpha = 0, \dots, k-1; \chi = R, L)$$

sind - der Regularität von $\partial\Omega$ entsprechend ³⁾ - stetig für $k \leq 2$ (/54, ch.2; thm.4.11 und thm.5.5/), lassen sich also zu eindeutig bestimmten stetigen linearen Abbildungen auf ganz $W_2^{(k)}(\Omega)$ fortsetzen (die sogenannten

3) Ω gehört in der Schreibweise von /54/ zur Klasse $\mathcal{W}^{(0),1}$, hat also einen Lipschitzstetigen Rand $\partial\Omega$.

Spurooperatoren). Der Einfachheit halber bezeichnen wir diese mit denselben Symbolen $\partial_n^\alpha \psi_j$ bzw. $\partial_n^\alpha \psi_\chi$ und vereinbaren, daß im folgenden Randwerte stets im Sinne der Spurbildung zu verstehen sind.

Wollen wir - wie in der Quantenmechanik üblich - die Schrödingergleichung (2.2) als Gleichung im Hilbertraum $L_2(\Omega)$ auffassen, müssen ihre Lösungen in $W_2^{(k)}(\Omega)$ mit $k \geq 2$ liegen; andererseits macht es im Hinblick auf die Wohldefiniertheit der Spurooperatoren keinen Sinn, eine größere Regularität als $k = 2$ zu fordern, sodaß als Definitionsbereich $D(H)$ des Schrödingeroperators $H = -\Delta + w$ ein Teilraum von $W_2^{(2)}(\Omega)$ zu wählen ist. Damit für $\psi \in D(H)$ auch $w \cdot \psi$ in $L_2(\Omega)$ liegt, muß man nun natürlich noch die Regularität des Potentials w festlegen. Da nach dem Kondrašovschen Einbettungstheorem (siehe z.B. /54, ch.2, §6.1/) der Raum $W_2^{(2)}(\Omega)$ in $\mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$ eingebettet ist, gilt für quadratintegrale Potentiale w und für $\psi \in W_2^{(2)}(\Omega)$:

$$(2.23) \quad \int_{\Omega} |w\psi|^2 d^3r \leq \max_{\vec{r} \in \bar{\Omega}} |\psi(\vec{r})|^2 \cdot \int_{\Omega} |w|^2 d^3r < \infty$$

Es sei daher im folgenden stets vorausgesetzt:

$$(2.24) \quad w \in L_2(\Omega)$$

Die so definierte Klasse von Potentialen ist groß genug, um die in konkreten Anwendungen auftretenden Fälle (wie z.B. Potentiale mit Coulombsingularitäten) einzuschließen.

2.1.2 Der Δ - Operator

Die heuristischen Betrachtungen des nächsten Abschnittes zeigen, daß es mathematisch und physikalisch sinnvoll ist, den bei der Randbedingung (2.17) auftretenden Operator Δ - vage gesprochen - als Wurzel des mit -1 multiplizierten zweidimensionalen Laplace-Operators (d.h. der kinetischen Energie parallel zu den Ebenen $z = \text{constans}$)

$$(2.25) \quad \bar{\Delta} := \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}_\parallel^2}$$

zu wählen. Um einigen hierbei zu vollziehenden formalen Rechenschritten einen präzisen Sinn zu verleihen, soll die Konstruktion des $\wedge$ -Operators vorab vorgenommen werden.

Zunächst sei festgestellt, daß für die Sobolevräume $W_2^{(k)}(Z)$ entsprechende Aussagen gelten wie für $W_2^{(k)}(\Omega)$; insbesondere existieren für $k = 1, 2$ die Spuoperatoren

$$(2.26) \quad \text{tr}: W_2^{(k)}(Z) \longrightarrow L_2(\Gamma_1)$$

als stetige Fortsetzungen der linearen Abbildungen

$$(2.27) \quad \mathcal{C}^\infty(\bar{Z}) \ni u \longmapsto \partial_n^\alpha u_j \in L_2(\Gamma_1) \quad (\alpha = 0, \dots, k-1; j = 0, 1),$$

wobei

$$(2.28) \quad \partial_n^\alpha u_1(\vec{r}_b) := \lim_{\vec{r}_b' \rightarrow \vec{r}_b} (\vec{n}(\vec{r}_b) \vec{\nabla})^\alpha u(\vec{r}_b') \quad \text{für } \vec{r}_b \in \Gamma_1$$

$$(2.29) \quad \partial_n^\alpha u_0(\vec{r}_b) := \lim_{\vec{r}_b' \rightarrow \vec{r}_b + \vec{T}_k} (\vec{n}(\vec{r}_b) \vec{\nabla})^\alpha u(\vec{r}_b') \quad \text{für } \vec{r}_b \in \Gamma_{k,1} \text{ und} \\ \Gamma_{k,0} = \vec{T}_k + \Gamma_{k,1}$$

gesetzt ist; $\vec{n}(\vec{r}_b)$ ist die fast überall auf ∂Z existierende äußere Normale von Z (siehe Figur 2.1.a).

Der Laplaceoperator $\bar{\Delta}$ werde auf dem Definitionsbereich

$$(2.30) \quad D(\bar{\Delta}) := \{ u \in \mathcal{C}^2(\bar{Z}) \mid \partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1 \text{ auf } \Gamma_1 \quad (\alpha = 0, 1) \}$$

betrachtet (die Übertragungsfunktion t ist analog zu Gl.(2.15) definiert). Als (unbeschränkter) Operator im Hilbertraum $L_2(Z)$ ist $-\bar{\Delta}$ symmetrisch

$$(2.31) \quad \langle v | -\bar{\Delta} u \rangle_{L_2(Z)} = \int_Z \vec{\nabla} v^* \vec{\nabla} u \, d^2 r_b = \langle -\bar{\Delta} v | u \rangle_{L_2(Z)} \quad \text{für } u, v \in D(\bar{\Delta})$$

und im Falle $\vec{k}_b \neq 0$ (d.h. $t \neq 1$) sogar positiv definit, was eine

unmittelbare Konsequenz der Friedrichschen Ungleichung ist (zum Beweis siehe Anhang 1):

$$(2.32) \quad \|u\|_{L_2(Z)}^2 \leq \kappa(t, Z) \cdot \int_Z |\vec{\nabla} u|^2 d^2 r_n \quad \text{für } u \in \mathcal{C}^1(\bar{Z}) \text{ mit} \\ \partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1 \text{ auf } \Gamma_1 \ (\alpha=0,1),$$

wobei $\kappa(t, Z)$ eine von $\vec{k}_n$ und Z abhängige positive Konstante ist. Um auch im Falle $\vec{k}_n = \vec{0}$ positive Definitheit zu erhalten, betrachten wir statt $-\bar{\Delta}$ besser den Operator

$$(2.33) \quad T := -\bar{\Delta} + E_0(\vec{k}_n) \quad , \quad D(T) := D(\bar{\Delta}) \quad ,$$

wobei $\vec{k}_n \mapsto E_0(\vec{k}_n) \geq 0$ eine beliebige Funktion auf $\overline{BZ}_1$ mit $E_0(\vec{0}) > 0$ bezeichnet ⁴⁾. Der Operator T ist nun für jeden Wert von $\vec{k}_n$ symmetrisch und positiv definit; daher läßt sich T in kanonischer Weise (siehe z.B. /53, ch.5, §7;/61, Vol.II, thm.X.23/ oder /67, §5.5/) zu einem selbstadjungierten positiv definiten Operator $\hat{T}$ fortsetzen (die sogenannte Friedrichsche Fortsetzung). Die Konstruktion sei hier konkret durchgeführt:

Der "energetische Raum" zu T , bezeichnet mit $H_t^{(1)}(Z)$, ist die Vervollständigung von $D(T)$ unter der vom Skalarprodukt

$$(2.34) \quad (u | v)_{H_t^{(1)}(Z)} := \langle u | Tv \rangle_{L_2(Z)} = \int_Z \vec{\nabla} u^* \cdot \vec{\nabla} v \, d^2 r_n + E_0 \cdot \int_Z u^* v \, d^2 r_n$$

induzierten energetischen Norm $\| \cdot \|_{H_t^{(1)}(Z)} = \sqrt{(\cdot | \cdot)}_{H_t^{(1)}(Z)}$. Da diese

äquivalent zur Sobolevnorm $\| \cdot \|_{1,Z}$ (vgl. Def. (2.20)) ist, zeigt man leicht (Anhang 2):

$$(2.35) \quad H_t^{(1)}(Z) = \{ u \in W_2^{(1)}(Z) \mid u_0 = t \cdot u_1 \}$$

$H_t^{(1)}(Z)$ liegt dicht in $L_2(Z)$ mit stetiger Inklusionsabbildung. Der

4) Da $\vec{k}_n$ einen festen Parameter des Problems darstellt, wird im folgenden statt $E_0(\vec{k}_n)$ nur kurz E_0 geschrieben.

Definitionsbereich $D(\hat{T})$ ist gegeben durch

$$(2.36) \quad D(\hat{T}) := \{u \in H_t^{(1)}(Z) \mid \text{Die Linearform } H_t^{(1)}(Z) \ni v \mapsto (u|v)_{H_t^{(1)}(Z)} \text{ ist in der } L_2(Z)\text{-Norm beschränkt}\}.$$

Im vorliegenden Falle erweist sich (Anhang 3):

$$(2.37) \quad D(\hat{T}) = \{u \in W_2^{(1)}(Z) \mid \bar{\Delta} u \in L_2(Z); \partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1 \quad (\alpha = 0, 1)\}$$

Nach dem Riesz'schen Darstellungssatz (siehe z.B. /56,Nr.30/ oder /61,Vol.I, thm.II.4/) existiert für $u \in D(\hat{T})$ genau ein Element $\hat{T}u \in L_2(Z)$ mit

$$(2.38) \quad (u|v)_{H_t^{(1)}(Z)} = \langle \hat{T}u | v \rangle_{L_2(Z)} \quad \text{für alle } v \in H_t^{(1)}(Z),$$

womit die Friedrichsche Fortsetzung $D(\hat{T}) \ni u \mapsto \hat{T}u \in L_2(Z)$ abstrakt erklärt ist; in der hier gegebenen Situation erhält man $\hat{T}$ konkret, indem man $\bar{\Delta}$ als Distributionsableitung auffaßt und $\bar{\Delta} u \in L_2(Z)$ fordert. Es ist leicht zu sehen, daß $D(\hat{T})$ dicht in $L_2(Z)$ liegt und $\hat{T}$ selbstadjungiert ist. Die nach dem Spektralsatz (siehe z.B. /53,ch.6/) existierende diskrete Spektraldarstellung läßt sich explizite angeben:

$$(2.39) \quad \hat{T} = \sum_{\vec{g} \in G_2}^* T_{\vec{g}} |\vec{w}_{\vec{g}}\rangle \langle \vec{w}_{\vec{g}}| \quad \text{in } L_2(Z)$$

mit Eigenwerten ⁵⁾

$$(2.40) \quad T_{\vec{g}} = |\vec{k}_u + \vec{g}|^2 + E_0(\vec{k}_u) \quad (\vec{g} \in G_2^*)$$

und der Orthonormalbasis der Eigenvektoren in $L_2(Z)$

$$(2.41) \quad \vec{w}_{\vec{g}}(\vec{r}_u) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i(\vec{k}_u + \vec{g}) \cdot \vec{r}_u} \quad (\vec{g} \in G_2^*)$$

(A = Fläche der zweidimensionalen Elementarzelle).

5) Insbesondere ist die untere Schranke von $\hat{T}$ durch $T_{\vec{0}} = |\vec{k}_u|^2 + E_0(\vec{k}_u)$ gegeben.

Vermöge dieser Spektraldarstellung können die Potenzen $\hat{T}^\beta$ für $\beta \in \mathbb{R}$ definiert werden (siehe z.B. /56,Nr.127/; /57,XI,§12/ oder /61,Vol.I, thm.VIII.6/), insbesondere der Operator

$$(2.42) \quad \mathcal{A}_1 := \hat{T}^{1/2}.$$

$\mathcal{A}_1$ ist selbstadjungiert und positiv als Operator in $L_2(Z)$ (/62,ch.V, §3.11/), mit Definitionsbereich

$$(2.43) \quad D(\mathcal{A}_1) = \left\{ u \in L_2(Z) \mid \sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^* |\langle w_{\vec{g}} | u \rangle_{L_2(Z)}|^2 < \infty \right\}$$

Es gilt (siehe Anhang 3)

$$(2.44) \quad D(\mathcal{A}_1) = H_t^{(1)}(Z)$$

und aus Gleichung (2.38) leitet man ab:

$$(2.45) \quad (u | v)_{H_t^{(1)}(Z)} = \langle \mathcal{A}_1 u | \mathcal{A}_1 v \rangle_{L_2(Z)} \quad \text{für } u, v \in H_t^{(1)}(Z)$$

Im Hinblick auf die in Abschnitt 2.3 dargestellte Lösungstheorie werden noch zwischen $D(\hat{T})$, $H_t^{(1)}(Z)$ und $L_2(Z)$ "interpolierende" Hilberträume

$$(2.46) \quad D(\hat{T}) \subset H_t^{(3/2)}(Z) \subset H_t^{(1)}(Z) \subset H_t^{(1/2)}(Z) \subset L_2(Z)$$

erklärt; die Konstruktion ist kanonisch (siehe z.B. /58,Vol.I,ch.1,§2.1, §2.4 und §7.3/): Für $s \geq 0$ sei

$$(2.47) \quad H_t^{(s)}(Z) := D(\mathcal{A}_1^s) = \left\{ u \in L_2(Z) \mid \sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^s |\langle u | w_{\vec{g}} \rangle_{L_2(Z)}|^2 < \infty \right\}$$

(der Definitionsbereich des selbstadjungierten Operators $\mathcal{A}_1^s$ in $L_2(Z)$ (/61,Vol.I, thm.VIII,6/))

mit dem Skalarprodukt

$$(2.48) \quad (u | v)_{H_t^{(s)}(Z)} := \langle \mathcal{A}_1^s u | \mathcal{A}_1^s v \rangle_{L_2(Z)} \quad \text{für } u, v \in H_t^{(s)}(Z).$$

Nach Anhang 3 erzeugt dieses Skalarprodukt dieselbe Topologie auf $H_t^{(s)}(Z)$ wie die üblicherweise benutzte Graphennorm von $\mathcal{A}_1^s$ ($\|u\| = (\|u\|_{L_2(Z)}^2 + \|\mathcal{A}_1^s u\|_{L_2(Z)}^2)^{1/2}$) und die Inklusionen (2.46) sind stetig, wobei jeder Hilbertraum im jeweils größeren dicht liegt. Insbesondere gilt:

$$(2.49) \quad H_t^{(2)}(Z) = D(\hat{T}) \quad \text{und} \quad H_t^{(0)}(Z) = L_2(Z).$$

Für $s \geq 1$ läßt sich $\mathcal{A}_1$ als isometrische, isomorphe Abbildung

$$(2.50) \quad \mathcal{A}_1: H_t^{(s)}(Z) \longrightarrow H_t^{(s-1)}(Z) \subset L_2(Z)$$

auffassen.

Um den Operator $\mathcal{A}_1$ auch auf Funktionen aus $H_t^{(s)}(Z)$ für $s < 1$ anwenden zu können, sollen schließlich noch die Distributionsräume $H_t^{(-s)}(Z)$ eingeführt werden: Zu dem in $H_t^{(s)}(Z)$ dicht liegenden Grundraum von Testfunktionen

$$(2.51) \quad \mathcal{D}_t(Z) := \{ u \in \mathcal{C}^\infty(\bar{Z}) \mid u(\vec{r}_n) = e^{i\vec{K}_n \cdot \vec{r}_n} \hat{u}(\vec{r}_n) \text{ und} \\ \hat{u}: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C} \text{ ist gitterperiodisch bzgl. } G_2 \},$$

versehen mit der üblichen Schwartzschen Topologie (/59, S.266 ff./), betrachten wir dessen topologisches Dual

$$(2.52) \quad \mathcal{D}_t(Z)' := \{ u: \mathcal{D}_t(Z) \rightarrow \mathbb{C} \text{ linear und stetig} \},$$

den Raum der ("Bloch-periodischen") Distributionen auf Z (vgl. /70/); der Wert von $u \in \mathcal{D}_t(Z)'$ auf $\varphi \in \mathcal{D}_t(Z)$ sei mit $\langle u | \varphi \rangle_Z$ bezeichnet ⁶⁾. Für $s \geq 0$ wird dann der Raum $H_t^{(-s)}(Z)$ erklärt als dualer Raum zu $H_t^{(s)}(Z)$ gemäß

6) Allgemeiner bezeichne $\langle \cdot | \cdot \rangle_Z$ die Dualität auf $H_t^{(-s)}(Z) \times H_t^{(s)}(Z)$, siehe (A.3.53).

$$(2.53) \quad H_t^{(-s)}(Z) := \{ u \in \mathcal{D}_t(Z)' \mid \text{es existiert } C > 0 \text{ mit} \\ | \langle u | \varphi \rangle_Z | \leq C \cdot \| \varphi \|_{H_t^{(s)}(Z)} \text{ für alle } \varphi \in \mathcal{D}_t(Z) \}$$

(d.h. als Raum der stetigen Funktionale $u: H_t^{(s)}(Z) \rightarrow \mathbb{C}$).

Nach Anhang 3 gilt (vgl. auch /58, Vol.I, ch.1, rem.7.6/)

$$(2.54) \quad H_t^{(-s)}(Z) = \{ u \in \mathcal{D}_t(Z)' \mid \sum_{\vec{g} \in G_2} \star T_{\vec{g}}^{-s} | \langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z |^2 < \infty \} ;$$

man sieht, daß somit Def. (2.47) in konformer Weise verallgemeinert wird.
Das Skalarprodukt

$$(2.55) \quad (u | v)_{H_t^{(-s)}(Z)} := \sum_{\vec{g} \in G_2} \star \langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z T_{\vec{g}}^{-s} \langle v | w_{\vec{g}} \rangle_Z^{\star} \text{ für } u, v \in H_t^{(-s)}(Z),$$

dessen induzierte Norm gerade die (üblicherweise verwendete) Supremumsnorm ist, macht $H_t^{(-s)}(Z)$ zum Hilbertraum. Der Operator $\mathcal{A}_1$ läßt sich damit auch für $s < 1$ als isometrischer Isomorphismus

$$(2.56) \quad \mathcal{A}_1: H_t^{(s)}(Z) \longrightarrow H_t^{(s-1)}(Z) \subset \mathcal{D}_t(Z)'$$

auffassen, indem man seine Wirkung auf (u.U. verallgemeinerte) Funktionen vermöge Transposition definiert als

$$(2.57) \quad \langle \mathcal{A}_1 u | \varphi \rangle_Z := \langle u | \mathcal{A}_1 \varphi \rangle_Z \text{ für } u \in H_t^{(s)}(Z) \text{ und } \varphi \in \mathcal{D}_t(Z) .$$

Insbesondere ist $\mathcal{A}_1$ also eine Isometrie zwischen $H_t^{(1/2)}(Z)$ und seinem Dual $H_t^{(-1/2)}(Z)$, den beiden Räumen, deren Elemente in Abschnitt 2.3 die Rolle der Randdaten b_X ($X = R, L$) übernehmen werden. Die Beziehung aller oben erklärten Räume zueinander mag zusammenfassend durch

$$(2.58) \quad \mathcal{D}_t(Z) \subset H_t^{(s)}(Z) \subset H_t^{(r)}(Z) \subset L_2(Z) \subset H_t^{(-r)}(Z) \subset H_t^{(-s)}(Z) \subset \mathcal{D}_t(Z)' \\ (0 \leq r \leq s)$$

verdeutlicht werden, wobei alle Inklusionen stetig sind und jeder Raum im jeweils größeren dicht liegt.

2.2 Heuristische Betrachtung des Einzelschichtproblems

2.2.1 Transformation auf Evolutionsform

Wir wollen nun zeigen, welche Implikationen die Vorgabe von Randbedingungen der Form (1.1) bzw. (1.2) mit sich bringt. Den der "Ausbreitungsmatrixmethode" zugrunde liegenden Ideen folgend und diese im Sinne der Theorie linearer Evolutionsgleichungen (/63/) formalisierend, fassen wir die Schrödingergleichung (2.2) als (abstrakte) gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung auf:

$$(2.59) \quad \frac{d^2 v}{dz^2} = \mathcal{O}(z)v \quad (z_L < z < z_R) \quad ;$$

hierbei bezeichnet v die Hilbertraumwertige Funktion

$$(2.60) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto v(z) := \psi(., z) \in H_t^{(1)}(Z)$$

und $\mathcal{O}(z)$ die operatorwertige Abbildung

$$(2.61) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto \mathcal{O}(z) := \hat{T} + w(., z) - (E + E_0).$$

Der Operator $\hat{T} = \Delta_1^2$ bildet $H_t^{(1)}(Z)$ auf $H_t^{(-1)}(Z)$ stetig ab; wir wollen uns das Potential w so gewählt denken, daß $\mathcal{O}(z)$ dieselbe Eigenschaft hat ⁷⁾, sodaß dann $\frac{d^2 v}{dz^2}$ als eine Distribution aus $H_t^{(-1)}(Z)$ aufgefaßt werden muß. Bezüglich der z -Abhängigkeit fordern wir demzufolge sinnvollerweise die Regularitätseigenschaft ⁸⁾

$$(2.62) \quad v \in L_2(z_L, z_R, H_t^{(1)}(Z)) \quad \text{und} \quad \frac{d^2 v}{dz^2} \in L_2(z_L, z_R, H_t^{(-1)}(Z)) \quad ,$$

7) Die im Hinblick auf die allgemeine Theorie (/63/) zu erfüllende Forderung " $\mathcal{O}(z): H_t^{(s)}(Z) \rightarrow H_t^{(-s)}(Z)$ ist stetig" wird also gerade mit $s = 1$ als kleinstem s erfüllt.

8) i) $L_2(a, b, X)$ bezeichnet den Hilbertraum der quadratintegrierbaren Hilbertraumwertigen Funktionen $f: [a, b] \rightarrow X$;

ii) Alle Ableitungen $\frac{d^n v}{dz^n}$ sind im Distributionssinne zu verstehen (siehe z.B. /58, Vol. I, p. 6/ und /69/).

woraus nach dem Theorem über die Ableitungsinterpolation (/58, Vol.I, ch.1, thm.2.3/) und dem Theorem über die Spurabbildung (/58, Vol.I, ch.1, thm.3.1/) folgt, daß die erste Ableitung für fast alle $z \in [z_L, z_R]$ in $L_2(Z)$ liegt mit

$$(2.63) \quad \frac{dv}{dz} \in L_2(z_L, z_R, L_2(Z)) = L_2(\Omega)$$

und daß $v(z)$ und $\frac{dv}{dz}(z)$ für jedes $z \in [z_L, z_R]$ (also nicht nur fast überall) eine "vernünftige" Funktion auf den Querschnitten $Z \times \{z\}$ darstellen:

$$(2.64) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto v(z) \in H_t^{(1/2)}(Z) \quad \text{ist stetig;}$$

$$(2.65) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto \frac{dv}{dz}(z) \in H_t^{(-1/2)}(Z) \quad \text{ist stetig.}$$

Um die DGI (2.59) auf Evolutionsform (d.h. auf eine DGI erster Ordnung) zu transformieren, setzen wir

$$(2.66) \quad u : [z_L, z_R] \rightarrow H_t^{(1)}(Z) \oplus L_2(Z), \quad u(z) := (v(z), \frac{dv}{dz}(z))^T$$

und erhalten nun

$$(2.67) \quad \frac{du}{dz} = A(z)u \quad (z_L < z < z_R)$$

mit der operatorwertigen Abbildung

$$(2.68) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto A(z) := \begin{pmatrix} 0 & , & \text{Id} \\ \alpha(z) & , & 0 \end{pmatrix} ;$$

für (fast) alle z ist $A(z)$ hierbei als lineare Abbildung

$$(2.69) \quad A(z) : H_t^{(1)}(Z) \oplus L_2(Z) \rightarrow L_2(Z) \oplus H_t^{(-1)}(Z)$$

zu betrachten. Versieht man die direkte Summe von Hilberträumen $V := H_t^{(1)}(Z) \oplus L_2(Z)$ mit dem Skalarprodukt von $H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$, so ist der bezüglich dieser Topologie duale Raum V' gerade $L_2(Z) \oplus H_t^{(-1)}(Z)$ (siehe Def.(2.48) und (2.55)):

$$(2.70) \quad V := H_t^{(1)} \oplus L_2(Z) \subset H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z) \subset V' = L_2(Z) \oplus H_t^{(-1)}(Z)$$

Bezeichnet $(\cdot|\cdot)_{V' \times V}$ die Dualität auf $V' \times V$, so ist für $u, v \in V$

$$(2.71) \quad (A(z)u|v)_{V' \times V} = \langle u_2 | \Lambda_1 v_1 \rangle_{L_2(Z)} + \langle \Lambda_1^{-1} \mathcal{O}(z) u_1 | v_2 \rangle_{L_2(Z)} \quad ;$$

also gilt wegen der Stetigkeit von $\mathcal{O}(z) : H_t^{(1)}(Z) \rightarrow H_t^{(-1)}(Z)$

$$(2.72) \quad |(A(z)u|v)_{V' \times V}| \leq \|u_2\|_{L_2(Z)} \|v_1\|_{H_t^{(1)}(Z)} + \|\mathcal{O}(z)\| \|u_1\|_{H_t^{(1)}(Z)} \|v_2\|_{L_2(Z)},$$

mithin

$$(2.73) \quad \|A(z)u\|_{V'} \leq (1 + \|\mathcal{O}(z)\|^2)^{1/2} \cdot \|u\|_V,$$

sodaß $A(z)$ eine stetige Abbildung $V \rightarrow V'$ darstellt.

Für die Norm von $\mathcal{O}(z)$ gilt hierbei (siehe (A.3.49) und (A.3.61)) :

$$(2.74) \quad \|\mathcal{O}(z)\| = \sup_{v \in H_t^{(1)}(Z)} \frac{\|(\Lambda_1^2 - (E + E_0) + w(\cdot, z))v\|_{H_t^{(-1)}(Z)}}{\|v\|_{H_t^{(1)}(Z)}} \leq \\ \leq 1 + \frac{|E + E_0|}{|\vec{k}_0|^2 + E_0} + \|w(\cdot, z)\|$$

Um die Diskussion auf das Wesentliche zu konzentrieren, nehmen wir an, daß $z \mapsto \|w(\cdot, z)\|$ auf $[z_L, z_R]$ eine beschränkte Funktion ist; dann liegt für $u \in L_2(z_L, z_R, V)$ die Funktion $z \mapsto A(z)u(z)$ im Raum $L_2(z_L, z_R, V')$.

2.2.2 Kritik der Propagatormethode

Wir sind nun in der Lage, dem bei der Ausbreitungsmatrixmethode (/30;/ /31;/ /32;/ /64/) bzw. der Transfermatrixmethode (/33;/ /31;/ /34/) vorliegenden Anfangswertproblem einen präzisen Sinn zu geben (siehe /63, §1.3/):

Gesucht ist eine Funktion $u \in L_2(z_L, z_R, V)$ derart, daß die DGl (2.67) (als Gleichung in $L_2(z_L, z_R, V')$!) erfüllt ist mit der Anfangsbedingung

$$(2.75) \quad u(z_L) = b = (b_0, b_1)^T \in H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$$

Daß als Anfangswerte Funktionen aus $H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$ zu wählen sind, resultiert aus dem Spurtheorem (Gl.(2.64) und (2.65)).

Die Formulierung des Anfangswertproblems wurde so gewählt, daß die Theorie abstrakter Differentialgleichungen (siehe z.B. /63,ch.I/ oder /58,Vol.I, ch.3,sec.4/) unmittelbar angewendet werden kann. Für eine eindeutige Lösbarkeit des Problems und eine stetige Abhängigkeit der Lösungen von den Anfangswerten sind alle Voraussetzungen erfüllt bis auf eine - und das ist unglücklicherweise die wesentliche: Es fehlt die sogenannte V-Koerzivität des Operators $A(z)$, d.h. die Ungleichung

$$(2.76) \quad \operatorname{Re}(A(z)u|u)_{V \times V} \geq \alpha \|u\|_V^2 - \lambda (\|u_1\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 + \|u_2\|_{H_t^{(-1/2)}(Z)}^2)$$

für alle $u \in V$ (mit $\alpha > 0$, $\lambda \in \mathbb{R}$ geeignet, aber fest gewählt)

läßt sich nicht befriedigen. Andernfalls könnte man nämlich

(mit $u_2 := -\mathcal{A}_1 u_1$; $u_1 \in H_t^{(1)}(Z)$) aus (2.76) sofort folgern:

$$(2.77) \quad 2(1+\alpha) \cdot \|u_1\|_{H_t^{(1)}(Z)}^2 \leq 2(\lambda \|u_1\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 + (|E+E_0| + \|w(\cdot, z)\|) \|u_1\|_{L_2(Z)}^2)$$

d.h. aus der Konvergenz in $H_t^{(1/2)}(Z)$ (bzw. in $L_2(Z)$, falls $\lambda = 0$) würde die Konvergenz in $H_t^{(1)}(Z)$ folgen, eine Aussage, die definitiv falsch ist! ⁹⁾ Es muß an dieser Stelle betont werden, daß das Fehlen der V-Koerzivität nicht auf irgendwelchen Irregularitäten des Potentials w beruht, sondern darauf, daß $\mathcal{A}_1$ als Operator in $L_2(Z)$ unbeschränkt ist. Die Konsequenz ist, daß die üblichen Beweismethoden für die eindeutige Lösbarkeit des Problems an entscheidender Stelle versagen (siehe z.B. /63,p.187 ff./)

Es bleibt die Frage, worin der Trugschluß derer liegt, die die Ausbreitungsmatrixmethode propagierten. Die Antwort ergibt sich unmittelbar aus ihrem Vorgehen, die Funktion u durch eine endliche Fouriersche Summe

9) Man erinnere sich an Def. (2.47): Es gibt Folgen $(\tilde{u}(\vec{g}))_{\vec{g} \in G_2^*}$ mit

$\sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^s |u(\vec{g})|^2 < \infty$ für $s = 1/2$ (bzw. $s = 0$), aber $\sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}} |\tilde{u}(\vec{g})|^2 = \infty$!

$$(2.78) \quad u(z) \approx u_N(z) = \sum_{j=1}^N \tilde{u}(\vec{g}_j, z) w_{\vec{g}_j} \quad ; \quad \tilde{u}(\vec{g}_j, z) := \langle w_{\vec{g}_j} | u(z) \rangle_{L_2(Z)}$$

zu approximieren und die DGL (2.67) im Sinne des Galerkinschen Verfahrens zu lösen, indem das Anfangswertproblem

$$(2.79) \quad \left(\frac{du_N}{dz} | v \right)_{V \times V} = (A(z) u_N | v)_{V \times V} \quad \text{für alle } v \in V_N$$

mit

$$(2.80) \quad u_N(z) \in V_N := \left\{ v = \sum_{j=1}^N \begin{pmatrix} \alpha_j \\ \beta_j \end{pmatrix} w_{\vec{g}_j} \mid \alpha_j, \beta_j \in \mathbb{C} \right\}$$

und Anfangswert

$$(2.81) \quad u_N(z_L) = b_N \in V_N \quad \text{mit} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} b_N = b \text{ in } H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$$

betrachtet wird. Die Gleichung (2.79) ist ein System gewöhnlicher DGLn der Dimension $2N$ und erlaubt eine eindeutige Lösung mit stetiger Abhängigkeit von b_N . In der Tat läßt sich für $u_N \in V_N$ auch die Ungleichung (2.76) mit $\alpha_N > 0$, $\lambda_N \in \mathbb{R}$ erfüllen; denn im Endlichdimensionalen sind alle Normen äquivalent, und jede lineare Abbildung, speziell $\mathcal{A}_1|_{V_N}$, ist beschränkt, sodaß auch die Abschätzung (2.77) für $u_N \in V_N$ richtig ist. Der wesentliche Punkt ist, daß man bei (2.76) keine gleichmäßige Abschätzung für $V_N \rightarrow V$ ($N \rightarrow \infty$) bekommt und damit der Voraussetzung beraubt wird, für $N \rightarrow \infty$ die Konvergenz der Fourierreihe (2.78) im Raum $L_2(z_L, z_R, V)$ zu erhalten (siehe /63, p.189, equ.(4.15)/); selbst wenn man also lokal für $z_L \leq z \leq z_L + \varepsilon$ eine wie immer geartete Konvergenz der Fourierreihe vorliegen hätte, sind deren Regularitätseigenschaften für wachsendes z ungesichert, ganz zu schweigen von einer Analyse der Abhängigkeit vom Anfangswert b .

Am Beispiel des freien Elektrons ($w = 0$) läßt sich dies eingehend illustrieren: Zur Vereinfachung betrachten wir nur die Energie $E = -E_0$; die

(formale) allgemeine Lösung der DGI (2.67) lautet dann

$$(2.82) \quad u(z) = \begin{pmatrix} U_R(z) & U_L(z) \\ \mathcal{A}_1 U_R(z) & -\mathcal{A}_1 U_L(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_R \\ a_L \end{pmatrix},$$

wobei die Operatoren U_R und U_L definiert sind als

$$(2.83) \quad U_R(z) := e^{\mathcal{A}_1(z-z_R)}; \quad U_L(z) := e^{\mathcal{A}_1(z_L-z)}.$$

Betrachtet man für ein $s \in \mathbb{R}$ die Abbildung $\mathcal{A}_1$ als Operator im Hilbertraum $H_t^{(s)}(Z)$, so ist für $z \in [z_L, z_R]$ der Definitionsbereich (/57, XI, §12/) von $U_R(z)$ und $U_L(z)$ jeweils ganz $H_t^{(s)}(Z)$ und beide Operatoren sind beschränkt (mit Norm ≤ 1)¹⁰⁾. Daher definiert (2.82) für $a_R, a_L \in H_t^{(1/2)}(Z)$ eine stetige Abbildung $[z_L, z_R] \ni z \mapsto u(z) \in H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$, die wegen

$$(2.84) \quad \frac{d}{dz} \|U_R(z)a_R\|_{H_t^{(s)}}^2(z) = 2 \cdot \|U_R(z)a_R\|_{H_t^{(s+1/2)}}^2(z)$$

und der analogen Gleichung für $U_L(z)$ auch im Raum $L_2(z_L, z_R, V)$ liegt.

Will man nun mit dem Ansatz (2.82) die Anfangsbedingung (2.75) befriedigen, wird man auf die folgenden Bestimmungsgleichungen für a_R und a_L geführt:

$$(2.85) \quad a_L = 1/2(b_0 - \mathcal{A}_1^{-1}b_1)$$

$$(2.86) \quad e^{-\mathcal{A}_1 d} a_R = 1/2(b_0 + \mathcal{A}_1^{-1}b_1) \quad \text{mit} \quad d := z_R - z_L$$

Die erste dieser beiden Gleichungen bildet $(b_0, b_1)^T \in H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$ auf ein $a_L \in H_t^{(1/2)}(Z)$ ab und liefert damit genau die gewünschte Regularität für a_L ; die zweite Gleichung jedoch ist nur dann mit einer Funktion $a_R \in H_t^{(1/2)}(Z)$ lösbar, wenn die rechte Seite im Wertbereich $e^{-\mathcal{A}_1 d}(H_t^{(1/2)}(Z))$ des (in $H_t^{(1/2)}(Z)$ nicht invertierbaren!) Operators $e^{-\mathcal{A}_1 d}$ liegt, was bedeutet, daß nur Anfangswerte b mit

10) $D_s(U_R(z)) = \{u \in H_t^{(s)}(Z) \mid \sum_{\tilde{g} \in G_2} \exp(2T_{\tilde{g}}^{1/2}(z-z_R)) |T_{\tilde{g}}^s \tilde{u}(\tilde{g})|^2 < \infty\} = H_t^{(s)}(Z)$

mit Hilfe der Charakterisierungen (2.47) bzw. (2.54); analog für $D(U_L(z))$.

$$(2.87) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^{1/2} \exp(2T_{\vec{g}}^{1/2}d) |\tilde{b}_0(\vec{g}) + T_{\vec{g}}^{-1/2} \tilde{b}_1(\vec{g})|^2 < \infty$$

zugelassen sind. Das Anfangswertproblem (2.75) ist somit im allgemeinen nicht lösbar.

Wendet man trotzdem für ein vorgegebenes $b \in H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$ rein schematisch das Galerkinsche Verfahren an, indem man b durch seine Fourier-schen Partialsummen b_N gemäß (2.78) approximiert und das Anfangswertproblem (2.79) - (2.81) löst, erhält man zwar Partialsummen $u_N(z)$ der Gestalt (2.82) mit Koeffizienten $(a_{R,N}, a_{L,N})^T$, welche sich gemäß den nunmehr endlichdimensionalen Matrizengleichungen (2.85) und (2.86) aus b_N bestimmen lassen, aber $(a_{R,N})_{N \in \mathbb{N}}$ konvergiert im allgemeinen nicht gegen ein a_R aus $H_t^{(1/2)}(Z)$, weil $e^{-\Lambda_1 d}$ keine stetige Inverse besitzt. Deshalb konvergiert $(u_N)_{N \in \mathbb{N}}$ im allgemeinen auch nicht gegen ein $u \in L_2(Z_L, Z_R, V)$, selbst wenn $(u_N(z))_{N \in \mathbb{N}}$ in einer Umgebung von z_L gegen eine $u(z) \in V$ konvergiert.

Beispielsweise liegt für $0 < \delta < d$ der Anfangswert

$$(2.88) \quad b := (b_0, 0)^T \quad ; \quad b_0 := \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \tilde{b}_0(\vec{g}) w_{\vec{g}}$$

mit

$$(2.89) \quad \tilde{b}_0(\vec{g}) := T_{\vec{g}}^{-1/2} \exp(-T_{\vec{g}}^{1/2}(d - \delta))$$

im Raum $H_t^{(1/2)}(Z) \oplus H_t^{(-1/2)}(Z)$; die Fourierkoeffizienten der Partialsummen $u_N(z)$ sind gegeben durch

$$(2.90) \quad \tilde{u}_1(\vec{g}, z) = 1/2 \cdot T_{\vec{g}}^{-1/2} [\exp(T_{\vec{g}}^{1/2}(z - z_R + \delta)) + \exp(T_{\vec{g}}^{1/2}(z_L - z + \delta - d))]$$

$$(2.91) \quad \tilde{u}_2(\vec{g}, z) = 1/2 [\exp(T_{\vec{g}}^{1/2}(z - z_R + \delta)) - \exp(T_{\vec{g}}^{1/2}(z_L - z + \delta - d))] .$$

Für $z_L \leq z < z_R - \delta$ konvergiert $(u_N(z))_{N \in \mathbb{N}}$ in V , weil

$$(2.92) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^{2-j} |\tilde{u}_j(\vec{g}, z)|^2 < \infty \quad (j=1,2) \quad ,$$

aber für $z_R - \delta < z < z_R$ ist $\lim_{N \rightarrow \infty} \|u_N(z)\|_V^2 = \infty$, weshalb

$(u_N)_{N \in \mathbb{N}}$ in $L_2(z_L, z_R, V)$ jedenfalls keinen Grenzwert besitzt; bestenfalls kann man für $z \geq z_R - \delta$ der Folge $(u_N(z))_{N \in \mathbb{N}}$ eine Distribution aus $\mathcal{D}'_t(Z)$ als Grenzelement zuordnen.

Es sei angemerkt, daß die hier dargestellte Problematik selbstverständlich auch direkt im Rahmen der klassischen Theorie partieller Differentialgleichungen behandelt werden kann: Die Randbedingung (1.1) definiert ein Cauchy-Problem für einen elliptischen Differentialoperator, und es ist bestens bekannt, daß dieses Problem mathematisch inkorrekt ¹¹⁾ gestellt ist, was sich darin niederschlägt, daß man "unphysikalische" Ergebnisse (/65/) erhalten kann.

Wir wollen diesen Abschnitt abschließen mit einer Interpretation der Funktionen a_R und a_L , von denen wir ja wissen, daß sie vermöge Gl. (2.82) eine stabile Parametrisierung der allgemeinen Lösung u der DGL (2.67) im Falle des freien Elektrons liefern. Durch Auswerten der Gl. (2.82) an den Randpunkten $z = z_R$ bzw. $z = z_L$ erhält man für $v = u_1$:

$$(2.93) \quad \mathcal{A}_1 v(z_R) + \frac{dv}{dz}(z_R) = 2\mathcal{A}_1 a_R \quad ; \quad \mathcal{A}_1 v(z_L) - \frac{dv}{dz}(z_L) = 2\mathcal{A}_1 a_L$$

Dies ist exakt die verallgemeinerte Ausstrahlungsbedingung (1.2) bzw. (2.17) mit

$$(2.94) \quad b_X := 2\mathcal{A}_1 a_X \quad ; \quad a_X \in H_t^{(1/2)}(Z) \quad ; \quad b_X \in H_t^{(-1/2)}(Z) \quad ; \quad (X=R, L) .$$

Es ist somit einsichtig, welchem einfachen Mißverständnis die Verfechter der Ausbreitungsmatrixmethode erlegen sind: Wäre die DGL (2.59) bzw. (2.67) ein (endlichdimensionales!) System gewöhnlicher Differentialgleichungen, würde man in der Tat sowohl über die Anfangsbedingung (2.75) $\equiv$ (1.1) als auch über die Zweipunkttrandbedingung (2.93) $\equiv$ (1.2) die volle Lösungsmannigfaltigkeit stetig parametrisieren, wobei die Umrechnung der Randdaten durch eine stetige lineare Transformation analog zu Gl. (2.85)/(2.86) erfolgte. Für abstrakte Differentialgleichungen in unendlichdimensionalen Räumen ist dies nicht der Fall, und genau dies wurde von jenen übersehen, die durch formale Rechnungen die Ausbreitungsmatrix (1.5) aus einer Streumatrix (1.6) abzuleiten versuchten (siehe z.B. /31, sec.V/).

11) Zum Begriff der korrekten Problemstellung siehe Abschnitt 2.1.1, insbesondere Bedingung (K1) - (K3), sowie den Anhang zu /58, Vol.II/.

2.2.3 Die korrekten Randdaten

Anknüpfend an das oben behandelte Beispiel des freien Elektrons soll nun - rein heuristisch, aber durchaus instruktiv - auch für den allgemeinen Fall ($w \neq 0$) plausibel gemacht werden, weshalb die Randbedingung (2.93) eine korrekte ¹¹⁾ Problemstellung gewährleistet.

Für eine Lösung u der DGL (2.67) betrachten wir einen zu Gl. (2.82) ähnlichen Ansatz ("Variation der Konstanten"):

$$(2.95) \quad u(z) = \begin{pmatrix} u_R(z) & u_L(z) \\ \mathcal{A}_1 u_R(z) & -\mathcal{A}_1 u_L(z) \end{pmatrix} \hat{u}(z) \quad ; \quad \hat{u}(z) = (u_R(z), u_L(z))^T$$

Damit u in $L_2(z_L, z_R, V)$ liegt, ist zu fordern, daß $\hat{u} \in \hat{V}$ gilt mit

$$(2.96) \quad \hat{V} := W^{(1)} \quad ,$$

wobei die Prähilberträume $W^{(s)}$ definiert werden als

$$(2.97) \quad W^{(s)} := \{ \hat{v}: [z_L, z_R] \rightarrow \mathcal{D}_t(Z)' \times \mathcal{D}_t(Z)' \mid u_R(z) \oplus u_L(z) \hat{v}(z) \in H_t^{(s)}(Z) \oplus H_t^{(s)}(Z) \\ \text{für fast alle } z; \int_{z_L}^{z_R} \|u_R(z) v_R(z)\|_{H_t^{(s)}(Z)}^2 + \|u_L(z) v_L(z)\|_{H_t^{(s)}(Z)}^2 dz < \infty \} \quad ,$$

versehen mit dem Skalarprodukt ¹²⁾

$$(2.98) \quad (\hat{u} | \hat{v})_{W^{(s)}} := \int_{z_L}^{z_R} \sum_{X=R,L} (u_X(z) u_X(z) | u_X(z) v_X(z))_{H_t^{(s)}(Z)} dz \quad .$$

Durch Einsetzen von (2.95) in (2.67) und formale Rechnung erhält man für $\hat{u}$ die Differentialgleichung

$$(2.99) \quad \left(- \frac{du_R}{dz}, \frac{du_L}{dz} \right)^T + M_0(z) \hat{u} = 0 \quad ,$$

wobei

$$(2.100) \quad M_0(z) := \\ := 1/2((u_R^{-1}(z) \mathcal{A}_1^{-1} \oplus u_L^{-1}(z) \mathcal{A}_1^{-1})(w(\cdot, z) - (E + E_0)) \begin{pmatrix} \text{Id}, \text{Id} \\ \text{Id}, \text{Id} \end{pmatrix} (u_R(z) \oplus u_L(z))) .$$

12) Die Räume $W^{(s)}$ haben damit formal die Struktur eines direkten Integrals von Hilberträumen (siehe z.B. /58, Vol. I, ch. 1, § 2.3/); die für eine Präzisierung dieses Sachverhalts notwendigen Überlegungen beinhalten allerdings etwas delicate Vollständigkeitsfragen und würden den hier gesetzten Rahmen sprengen.

Als Randbedingung für $\hat{u}$ folgt aus (2.93) sofort:

$$(2.101) \quad u_R(z_R) = a_R \quad \text{und} \quad u_L(z_L) = a_L$$

Da wir bereits wissen, daß $U_R(z)$ bzw. $U_L(z)$ in $H_t^{(s)}(Z)$ nicht invertierbar ist, muß noch präzisiert werden, in welchem Sinne das Randwertproblem (2.99)-(2.101) zu verstehen ist. Hierzu betten wir analog zum Vorgehen in den vorhergehenden Abschnitten $\hat{V}$ in zwei weitere Räume ein:

$$(2.102) \quad \hat{V} \subset \hat{H} \subset \hat{V}' \quad ; \quad \hat{H} := W^{(1/2)} \quad ; \quad \hat{V}' := W^{(0)}$$

Der Raum $\hat{V}'$ ist hierbei in dem Sinne dual zu $\hat{V}$, daß sich das Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{W^{(1/2)}}$ von $\hat{H}$ auch als Dualität auf $\hat{V}' \times \hat{V}$ interpretieren läßt gemäß

$$(2.103) \quad (\hat{u} | \hat{v})_{\hat{V}' \times \hat{V}} := \int_{z_L}^{z_R} \sum_{X=R,L} \langle U_X(z) u_X(z) | \mathcal{A}_1 U_X(z) v_X(z) \rangle_{L_2(Z)} dz$$

für $\hat{u} \in \hat{V}' \quad \hat{v} \in \hat{V} \quad ,$

wobei gilt:

$$(2.104) \quad (\hat{u} | \hat{v})_{\hat{V}' \times \hat{V}} = (\hat{u} | \hat{v})_{W^{(1/2)}} \quad \text{für} \quad \hat{u} \in \hat{H}, \hat{v} \in \hat{V} \quad .$$

Der Operator M_0 (Gl. (2.100)) ist dann als lineare Abbildung von $\hat{V}$ nach $\hat{V}'$ definiert durch die Beziehung

$$(2.105) \quad (M_0 \hat{u} | \hat{v})_{\hat{V}' \times \hat{V}} =$$

$$= \int_{z_L}^{z_R} \frac{1}{z} \langle U_R(z) u_R(z) + U_L(z) u_L(z) | w(\cdot, z) - (E + E_0) | U_R(z) v_R(z) + U_L(z) v_L(z) \rangle_{L_2(Z)} dz \quad .$$

Wir können nun folgenden Lösungsbegriff für das Randwertproblem (2.59)/(2.93) formulieren: Eine Funktion v ist Lösung, wenn $(v, \frac{dv}{dz})^T$ in der Form (2.95) darstellbar ist mit einem $\hat{u} \in \hat{V}$, welches die DGl (2.99) im Raum $\hat{V}'$ und die Randbedingung (2.101) im Raum $H_t^{(1/2)}(Z)$ erfüllt.

Wir wollen nun einmal annehmen, $\hat{u}$ sei eine Lösung. Dann gilt also (2.99) in $\hat{V}'$, woraus durch Integration der Beziehungen

$$(2.106) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dz} \|u_R(z) u_R(z)\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 = \\ = \operatorname{Re} \langle u_R(z) \frac{du_R}{dz}(z) \wedge_1 u_R(z) u_R(z) \rangle_{L_2(Z)} + \|u_R(z) u_R(z)\|_{H_t^{(1)}(Z)}^2$$

$$(2.107) \quad \frac{1}{2} \frac{d}{dz} \|u_L(z) u_L(z)\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 = \\ = \operatorname{Re} \langle u_L(z) \frac{du_L}{dz}(z) \wedge_1 u_L(z) u_L(z) \rangle_{L_2(Z)} - \|u_L(z) u_L(z)\|_{H_t^{(1)}(Z)}^2$$

über das Intervall $[z_L, z_R]$ sofort zu schließen ist:

$$(2.108) \quad 2 \operatorname{Re}(M_0 \hat{u} | \hat{u})_{\hat{V} \times \hat{V}} + 2 \|\hat{u}\|_{\hat{V}}^2 + \|e^{-\Lambda_1 d} u_R(z_L)\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 + \\ + \|e^{-\Lambda_1 d} u_L(z_R)\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 = \|a_R\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 + \|a_L\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2$$

Nehmen wir nun weiter an, daß eine Konstante $\beta \in (0,1)$ existiert mit der Eigenschaft

$$(2.109) \quad \operatorname{Re}(M_0 \hat{v} | \hat{v})_{\hat{V} \times \hat{V}} + \beta \|\hat{v}\|_{\hat{V}}^2 \geq 0 \quad \text{für alle } \hat{v} \in \hat{V},$$

so erhalten wir mit $\alpha := 2(1-\beta) > 0$ für die Lösung $\hat{u}$ die grundlegende Abschätzung

$$(2.110) \quad \alpha \|\hat{u}\|_{\hat{V}}^2 + \|e^{-\Lambda_1 d} u_R(z_L)\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 + \|e^{-\Lambda_1 d} u_L(z_R)\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 \leq \\ \leq \|a_R\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2 + \|a_L\|_{H_t^{(1/2)}(Z)}^2,$$

d.h. durch die Norm der vorgegebenen Randdaten $a_R, a_L \in H_t^{(1/2)}(Z)$ werden das in der $\hat{V}$ -Norm¹³⁾ gemessene Wachstum der Lösung v im Inneren des Intervalls $[z_L, z_R]$ und die Größe der Amplituden $u_R(z_L)$ und $u_L(z_R)$ von v am jeweils "freien" Ende des Intervalls kontrolliert, womit die Eindeutigkeit der Lösung und ihre stetige Abhängigkeit von den Randdaten garantiert ist.

13) Man beachte, daß sich die $\hat{V}$ -Norm von $\hat{u}$ physikalisch interpretieren läßt als Maß für die Energie des durch die Funktion v beschriebenen Teilchens.

Unter der Annahme der Gültigkeit der Ungleichung (2.109) läßt sich aber auch die Existenz einer Lösung nachweisen (z.B. im Rahmen der bei Lions & Magenes (/58, Vol. I, ch. 3, §§1-4/) ¹⁴⁾ dargestellten Theorie), sodaß also unter der Voraussetzung (2.109) in der Tat eine korrekte Problemstellung ¹¹⁾ vorliegt.

Leider läßt sich aber die Abschätzung (2.109) nur für Energien mit

$$(2.111) \quad -\infty < E < E_w \leq 0$$

erreichen, wobei E_w eine vom Potential w abhängige Schranke darstellt. Dies kann auch gar nicht anders sein, denn wie in den folgenden Abschnitten gezeigt wird, können für bestimmte Resonanzenergien $E = E_j$ ($E_w \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$) zu den Randwerten $a_R = a_L = 0$ nichttriviale Lösungen $\hat{u}_j \neq 0$ existieren; daher kann die Ungleichung (2.110) und damit (2.109) für diese Energiewerte nicht erfüllt sein. Damit könnte der hier skizzierte Weg für konkrete Rechnungen nur in einem physikalisch relativ uninteressanten Energiebereich begehbar gemacht werden, und aus diesem Grund wollen wir hier unseren heuristischen Exkurs beenden und uns einer Lösungstheorie zuwenden, die für alle Energien $E \neq E_j$ eine von den Randdaten a_R, a_L eindeutig und stetig abhängende Lösung liefert.

14) In dieser Theorie treten als Eingangsgrößen ein Operator M und eine (Kontraktions-)Halbgruppe $G(s)$ auf. Für den hier vorliegenden Fall wähle man $M := M_0 + \mathcal{A}_1 \oplus \mathcal{A}_1$ und

$$G(s)\hat{u}(z) := \left\{ \begin{array}{ll} e^{\mathcal{A}_1 s} (u_R(z+s), 0)^T & \text{für } z_L \leq z \leq z_L + s \\ e^{\mathcal{A}_1 s} (u_R(z+s), u_L(z-s))^T & \text{für } z_L + s < z \leq z_R - s \\ e^{\mathcal{A}_1 s} (0, u_L(z-s))^T & \text{für } z_R - s < z \leq z_R \\ (0, 0)^T & \text{für } s \geq d \end{array} \right\} \text{ und } 0 \leq s < d$$

2.3 Existenz, Eindeutigkeit und Stabilität von Lösungen des Einzelschichtproblems

Die Theorie zur Lösung elliptischer Randwertprobleme in Sobolev'schen Räumen ist auch für relativ allgemeine Randbedingungen, wie sie die Gleichungen (1.2) bzw. (2.17) darstellen, weit entwickelt. Wir wollen uns im wesentlichen auf die bei Stummel (/59/) entwickelte Form der Lösungstheorie stützen, da diese eine Spezialisierung auf den hier vorliegenden Fall unmittelbar gestattet.

Als Operator $\mathcal{A}$ in Gl.(2.17) lassen wir - in Verallgemeinerung des im letzten Abschnitt behandelten Falles - irgendein Element der Schar

$$(2.112) \quad \mathcal{A}_\alpha := \alpha \mathcal{A}_1 \quad (\alpha \geq 0)$$

zu.

2.3.1 Schwache Lösungen

Im Hinblick auf Variationsmethoden und numerische Techniken sollen zunächst solche Lösungen des Einzelschichtproblems (2.16)-(2.18) betrachtet werden, die die Schrödingergleichung (2.2) nur schwach (d.h. im Distributionssinn) erfüllen. Diese Lösungen entstammen dem Grundraum

$$(2.113) \quad H_t^{(1)}(\Omega) := \{ \varphi \in W_2^{(1)}(\Omega) \mid \varphi_0 = t \varphi_1 \text{ in } L_2(S_t) \}$$

(zur Notation siehe Abschnitt 2.1.1).

Da die Spurabbildung $W_2^{(1)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto \varphi_0 - t \varphi_1 \in L_2(S_t)$ stetig ist, wird $H_t^{(1)}(\Omega)$ als Nullstellengebilde dieser linearen Abbildung mit dem Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{1, \Omega}$ von $W_2^{(1)}(\Omega)$ zum Hilbertraum.

Wie in Anhang 4 gezeigt wird, bilden die Spurabbildungen

$H_t^{(1)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto \varphi_X \in L_2(F_X) \quad (X=R, L)$ (siehe (2.22) und Erläuterungen) den Raum $H_t^{(1)}(\Omega)$ surjektiv und stetig auf $H_t^{(1/2)}(F_X) \quad (X = R, L)$ ¹⁵⁾ ab. Es ist

15) Da nach Def.(2.10) $F_X = Z \times \{z_X\}$ gilt, sind die Räume $H_t^{(s)}(F_R)$ und $H_t^{(s)}(F_L)$ mit je einem Exemplar des Raumes $H_t^{(s)}(Z)$ zu identifizieren.

für eine kompakte Schreibweise zweckmäßig, die direkte Summe der Hilbert-räume $H_t^{(s)}(F_R)$ und $H_t^{(s)}(F_L)$ einzuführen:

$$(2.114) \quad H_t^{(s)}(F) := H_t^{(s)}(F_R) \oplus H_t^{(s)}(F_L) \quad (s \in \mathbb{R})$$

Für $s > 0$ ist das Skalarprodukt von $H_t^{(s)}(F)$ als Integral darstellbar gemäß

$$(2.115) \quad ((u_R, u_L) | (v_R, v_L))_{s,F} = \sum_{\chi \in R, L} \int_{F_\chi} (\mathcal{A}_1^s u_\chi)^* \mathcal{A}_1^s v_\chi d^2 r_\chi$$

und die Wirkung einer Linearform $u \in H_t^{(-s)}(F)$ auf eine Funktion $v \in H_t^{(s)}(F)$ läßt sich schreiben als

$$(2.116) \quad \langle u | v \rangle_F = \langle u_R | v_R \rangle_{F_R} + \langle u_L | v_L \rangle_{F_L}.$$

Die Randwerte einer Funktion $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ auf der Vereinigung $F := F_R \cup F_L$ können dann als ein Element von $H_t^{(1/2)}(F)$ betrachtet werden, und die Spurabbildung

$$(2.117) \quad \text{tr}|_F : H_t^{(1)}(\Omega) \longrightarrow H_t^{(1/2)}(F), \quad \varphi \mapsto (\varphi_R, \varphi_L)$$

ist stetig und surjektiv. Falls keine Verwechslung möglich ist, schreiben wir statt $\text{tr}|_F \varphi$ auch $\text{tr} \varphi$ oder einfach φ .

Multipliziert man die Schrödingergleichung (2.2) mit $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ und integriert über Ω , wird man auf die Gleichung

$$(2.118) \quad B(\psi, \chi) - E \langle \psi | \chi \rangle_\Omega = \langle b | \chi \rangle_F \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

geführt, wobei folgende Definitionen verwendet werden:

$$(2.119) \quad B(\varphi, \chi) := \int_\Omega (\vec{\nabla} \varphi^* \vec{\nabla} \chi + \varphi^* w \chi) d^3 r + \alpha (\text{tr} \varphi | \text{tr} \chi)_{1/2, F}$$

für $\varphi, \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$

$$(2.120) \quad \langle . | . \rangle_\Omega := (. | .)_{0, \Omega} = \text{Standardskalarprodukt auf } L_2(\Omega)$$

$$(2.121) \quad \langle b | \chi \rangle_F := \langle b | \text{tr} \chi \rangle_F \quad \text{mit } b = (b_R, b_L) \in H_t^{(-1/2)}(F)$$

Eine schwache Lösung des Einzelschichtproblems (2.16)-(2.18) wird eine Funktion $\psi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ dann genannt, wenn sie zu vorgegebenem $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ die Beziehung (2.118) erfüllt. Falls zu $b = 0$ eine nichttriviale schwache Lösung $\psi \neq 0$ existiert, heißt ψ (schwache) Eigenlösung des Einzelschichtproblems zum Eigenwert E .

Für die Bestimmung des Lösungsraumes benötigen wir den in Anhang 4 geführten Nachweis, daß folgende Bedingungen erfüllt sind:

(B1) B und $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ sind beschränkte Sesquilinearformen

$$H_t^{(1)}(\Omega) \times H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}.$$

(B2) $\text{tr}|_F: H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow H_t^{(1/2)}(F)$ ist beschränkt und das Bild

$$\text{tr}|_F(H_t^{(1)}(\Omega)) \text{ liegt dicht in } H_t^{(1/2)}(F).$$

(B3) Die Randwertaufgabe (2.118) ist symmetrisch, d.h. die Sesquilinearformen B und $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ sind hermitesch.

(B4) Die Randwertaufgabe (2.118) ist regulär, d.h. $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ ist als Sesquilinearform $H_t^{(1)}(\Omega) \times H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ vollstetig.

(B5) Die Randwertaufgabe (2.118) ist stark koerzitiv, d.h. es gibt ein $\beta > 0$ und ein $\hat{E} \in \mathbb{R}$, sodaß

$$(2.122) \quad \beta \cdot \|\varphi\|_{1,\Omega}^2 \leq B(\varphi, \varphi) - \hat{E} \langle \varphi | \varphi \rangle_\Omega \quad \text{für alle } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega).$$

Unter diesen Voraussetzungen befinden wir uns genau in der bei Stummel (/59, S.53, (1)-(4); S.57, (18)-(19)/) angenommenen Situation ¹⁶⁾ und erhalten mit dem Hauptsatz über verallgemeinerte Randwertprobleme (/59, S.54, (10)/) und die Zusätze für symmetrische Randwertprobleme (/59, S.82, (7); S.89, (37)-(38)/) die folgenden Resultate:

(L1) Die Eigenwerte von (2.118) sind reell, von endlicher Vielfachheit und bilden eine höchstens abzählbar unendliche Folge

$G = (E_1, E_2, E_3, \dots)$ mit $\hat{E} < E_1 < E_2 < E_3 < \dots$, die im Endlichen keinen Häufungspunkt besitzt ($\hat{E}$ ist durch Gl.(A.4.36) gegeben).

Eigenlösungen φ_j, φ_k mit $E_j \neq E_k$ genügen den Orthogonalitätsbeziehungen

16) Die Übertragung der hier verwendeten Bezeichnungen in die bei Stummel (/59/) ist gegeben durch: $V := H_t^{(1)}(\Omega)$, $b := B$, $k := \langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$,

$H := H_t^{(1/2)}(F)$, $E := \text{tr}|_F$, $H^* = H_t^{(-1/2)}(F)$, $l := b$.

$$(2.123) \quad B(\varphi_j, \varphi_k) = 0 \quad \text{und} \quad \langle \varphi_j | \varphi_k \rangle_{\Omega} = 0.$$

(L2) Es gilt die Fredholmsche Alternative:

Entweder ist E kein Eigenwert; dann existiert zu jedem $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ eine eindeutige Lösung $\psi_b \in H_t^{(1)}(\Omega)$ zur Randwertaufgabe (2.118).
Oder $E = E_j \in \mathcal{G}$ ist ein Eigenwert; dann ist die Aufgabe genau dann lösbar, wenn gilt:

$$(2.124) \quad \langle b | \varphi_{j,\nu} \rangle_F = 0 \quad \text{für alle Eigenvektoren } \{\varphi_{j,\nu} | \nu=1, \dots, N_j\} \text{ zu } E_j.$$

In diesem Fall ist die Lösung nur bis auf eine Linearkombination der Eigenlösungen $\varphi_{j,1}, \dots, \varphi_{j,N_j}$ bestimmt.

Bezüglich der Abhängigkeit der Lösung ψ_b vom Randwert b bekommt man nach Stummel (/59, Kap.1, §3.3/) und den ergänzenden Betrachtungen in Anhang 4 die Aussagen:

(L3) Für $E \in \mathcal{G} \setminus \mathcal{G}$ existiert ein Greenscher Operator

$$(2.125) \quad G_E : H_t^{(-1/2)}(F) \longrightarrow H_t^{(1)}(\Omega)$$

als stetige lineare Abbildung derart, daß für $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ die zugehörige Lösung gegeben ist durch

$$(2.126) \quad \psi_b = G_E b.$$

Die Regularität der Lösung läßt sich folgendermaßen charakterisieren (siehe /59, S.57, (20)/ und Anhang 4):

(L4) Sei die Sesquilinearform J_E auf $H_t^{(1)}(\Omega) \times H_t^{(1)}(\Omega)$ definiert durch

$$(2.127) \quad J_E := B - E \langle \cdot | \cdot \rangle_{\Omega}.$$

Die schwachen Lösungen $\{\psi_b | b \in H_t^{(-1/2)}(F)\}$ bilden den folgenden linearen Unterraum von $H_t^{(1)}(\Omega)$:

$$(2.128) \quad R(G_E) := \left\{ \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) \mid \text{Die Linearform } H_t^{(1)}(\Omega) \ni \chi \mapsto J_E(\varphi, \chi) \right. \\ \left. \text{ist in der Halbnorm } \|\text{tr} \chi\|_{H_t^{(1/2)}(F)} \text{ beschränkt} \right\}$$

Hieraus läßt sich sofort schließen, daß

$$(2.129) \quad \mathcal{C}_0^\infty(\Omega) \ni \chi \mapsto J_E(\psi, \chi) = \langle -\Delta\psi + (w-E)\psi | \chi \rangle_\Omega$$

stetig ist, was bedeutet, daß die Schrödingergleichung im Distributionssinn erfüllt wird.

Falls (!) eine schwache Lösung ψ in $W_2^{(2)}(\Omega)$ und $w\psi$ in $L_2(\Omega)$ liegt, erfüllt sie

$$(2.130) \quad \partial_n \psi_0 = t \partial_n \psi_1 \quad \text{in } L_2(S_t) \quad \text{und} \quad \mathcal{A}\psi + \partial_n \psi = b \quad \text{in } H_t^{(-1/2)}(F)$$

als natürliche Randbedingungen.

Schließlich gelten noch folgende Entwicklungssätze (/59, Kap.1, §3.4/):

(L5) Auf dem Grundraum $H_t^{(1)}(\Omega)$ wird durch

$$(2.131) \quad [\varphi, \chi] := B(\varphi, \chi) - \hat{E} \langle \varphi | \chi \rangle_\Omega \quad \text{für } \varphi, \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

($\hat{E}$ gemäß Gl.(A.4.36)) ein Skalarprodukt (das sogenannte energetische Skalarprodukt ¹⁷⁾) definiert; die davon induzierte Norm ist zur (ursprünglichen) Norm $\sqrt{(\cdot|\cdot)_1}_{1,\Omega}$ äquivalent. Werden die Eigenlösungen $(\varphi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ bezüglich des energetischen Skalarproduktes orthonormiert, gilt

$$(2.132) \quad \chi = \sum_{j \in \mathbb{N}} [\varphi_j, \chi] \varphi_j \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega) \quad ,$$

wobei die Konvergenz in der energetischen Norm oder der $\|\cdot\|_{1,\Omega}$ -Norm zu verstehen ist. Mit Hilfe dieser Reihenentwicklung läßt sich für jede Energie $E \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ die Wirkung des Greenschen Operators (2.125) auf einen Randwert b angeben:

$$(2.133) \quad \psi_b = \sum_{j \in \mathbb{N}} \frac{1}{E_j - E} \cdot \frac{\langle b | \text{tr} \varphi_j \rangle_F^*}{\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle_\Omega} \varphi_j$$

(Konvergenz in $H_t^{(1)}(\Omega)$!)

17) Zum Begriff des energetischen Raumes siehe /53, ch.5, §3/.

Die Eigenlösungen lassen sich aber auch als Orthogonalsystem in $L_2(\Omega)$ auffassen:

$$(2.134) \quad \chi = \sum_{j \in \mathbb{N}} \frac{\langle \varphi_j | \chi \rangle_{\Omega}}{\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle_{\Omega}} \varphi_j \quad \text{für alle } \chi \in L_2(\Omega)$$

(Konvergenz in $L_2(\Omega)$!)

2.3.2 Starke Lösungen

Man wird vermuten, daß die Lösungen ψ_b des Einzelschichtproblems eine umso höhere Regularität aufweisen, je "schöner" die Randvorgabe b ist. Der folgende Abschnitt soll zeigen, daß man in der Tat für $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ starke ("bessere") Lösungen ψ_b bekommt in dem Sinne, daß die Schrödingergleichung (2.2) in $L_2(\Omega)$ erfüllt wird und alle Randbedingungen, also auch die natürlichen Randbedingungen (2.130), zumindest in $L_2(S_t)$ bzw. $L_2(F)$ befriedigt werden.

Für solche starke Lösungen geht man aus von dem Ansatz

$$(2.135) \quad \psi = \varphi_0 + \varphi,$$

wobei φ_0 nur die Randbedingungen (2.17)/(2.18) zu einem vorgegebenem $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ zu erfüllen braucht und so regulär ist, daß die Anwendung des Schrödingeroperators eine L_2 -Funktion ergibt, sonst aber beliebig ist, während φ eine Lösung der inhomogenen Schrödingergleichung mit rechter Seite $\Delta \varphi_0 + (E - w) \varphi_0 \in L_2(\Omega)$ zu den homogenen Randbedingungen darstellt. Das Einzelschichtproblem zerfällt somit in zwei Teilprobleme:

- (A) Konstruktion eines zu b passenden φ_0
- (B) Lösung der inhomogenen Schrödingergleichung

$$(2.136) \quad (-\Delta + w - E)\varphi = f, \quad f \in L_2(\Omega)$$

mit homogenen Randbedingungen (2.17)/(2.18).

Zur Lösung des Teilproblems (A) betrachten wir den Raum

$$(2.137) \quad H_t^{(2)}(\Omega) := \{ \varphi \in W_2^{(2)}(\Omega) \mid \partial_n^\alpha \varphi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \quad (\alpha=0,1) \}.$$

Wegen der Stetigkeit der Spurabbildungen

$W_2^{(2)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto \partial_n^\alpha \varphi_0 - t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \in L_2(S_t) \quad (\alpha=0,1)$ ist $H_t^{(2)}(\Omega)$ als Kern dieser linearen Abbildungen mit dem Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{2,\Omega}$ von $W_2^{(2)}(\Omega)$ ein Hilbertraum.

Nach Anhang 4 bilden die Spurabbildungen

$H_t^{(2)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto (\varphi_X, \partial_n \varphi_X) \in L_2(F_X)^2 \quad (X = R, L)$ (siehe (2.22) und Erläuterungen) den Raum $H_t^{(2)}(\Omega)$ surjektiv und stetig auf $H_t^{(3/2)}(F_X) \oplus H_t^{(1/2)}(F_X)$ ($X = R, L$)¹⁵⁾ ab. Da ferner $\mathcal{A}_1: H_t^{(3/2)}(F_X) \rightarrow H_t^{(1/2)}(F_X)$ nach Anhang 3 (Beh.3.6) ein isometrischer Isomorphismus ist, stellt

$$(2.138) \quad \mathcal{A}: H_t^{(3/2)}(F_X) \rightarrow H_t^{(1/2)}(F_X); \quad (X=R, L; \mathcal{A} = \alpha \mathcal{A}_1; \alpha \geq 0)$$

eine stetige (und für $\alpha > 0$ surjektive) lineare Abbildung dar¹⁸⁾; daher ist auch

$$(2.139) \quad \mathcal{A} + \partial_n: H_t^{(2)}(\Omega) \rightarrow H_t^{(1/2)}(F), \varphi \mapsto (\mathcal{A}\varphi_R + \partial_n \varphi_R, \mathcal{A}\varphi_L + \partial_n \varphi_L)$$

eine stetige und surjektive lineare Abbildung. Deshalb gibt es also zu jedem Randdatum $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ eine Funktion $\varphi_0 \in H_t^{(2)}(\Omega)$ derart, daß gilt:

$$(2.140) \quad \mathcal{A}\varphi_0 + \partial_n \varphi_0 = b \text{ in } H_t^{(1/2)}(F)$$

Setzen wir den Ansatz (2.135) in (2.118) ein, erhalten wir als Bestimmungs-gleichung für φ

$$(2.141) \quad B(\varphi, \chi) - E\langle \varphi | \chi \rangle_\Omega = -J_E(\varphi_0, \chi) + \langle b | \chi \rangle_F \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

18) Vergleiche Bedingung (K5) (korrekte Problemstellung) in Abschnitt 2.1.1 (S.18).

oder nach partieller Integration ¹⁹⁾ die äquivalente Gleichung

$$(2.142) \quad B(\varphi, \chi) - E \langle \varphi | \chi \rangle_{\Omega} = - \langle -\Delta \varphi_0 + (w-E) \varphi_0 | \chi \rangle_{\Omega} \text{ für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega),$$

womit nunmehr das Teilproblem (B) vorliegt, nämlich zu vorgegebenem $f \in L_2(\Omega)$ das Randwertproblem

$$(2.143) \quad B(\varphi, \chi) - E \langle \varphi | \chi \rangle_{\Omega} = \langle f | \chi \rangle_{\Omega} \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

($I: H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$ bezeichnet die Inklusionsabbildung)

zu lösen.

Die oben entwickelten Gedanken präzisierend, wollen wir ein $\psi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ eine starke Lösung des Einzelschichtproblems (2.16)-(2.18) nennen, wenn es eine Darstellung nach (2.135) gestattet mit einem $\varphi_0 \in H_t^{(2)}(\Omega)$, welches die Randbedingung (2.140) erfüllt, und einem $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$, welches die Gleichung (2.143) mit $f = -(-\Delta \varphi_0 + (w-E) \varphi_0)$ löst. Falls zu $\varphi_0 = 0$ (d.h. $b = 0$) eine nichttriviale starke Lösung $\psi = \varphi \neq 0$ existiert, heißt ψ (starke) Eigenlösung des Einzelschichtproblems zum Eigenwert E .

Die zur Bestimmung des Lösungsraumes notwendigen Voraussetzungen sind identisch mit den Bedingungen (B1), (B3), (B4) und (B5) im letzten Abschnitt (S.41); nur die Bedingung (B2) ist - entsprechend der gegenüber Gl.(2.118) veränderten Linearform auf der rechten Seite von Gl.(2.143) - zu ersetzen durch

(B2') Die Inklusionsabbildung $I: H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$ ist vollstetig und $H_t^{(1)}(\Omega)$ liegt dicht in $L_2(\Omega)$.

Der Beweis dieser Aussage folgt unmittelbar aus dem Kondrašovschen Einbettungstheorem (siehe z.B. /54, ch.2, §6.1/) und der Tatsache, daß gilt: $\mathcal{E}_0^{\infty}(\Omega) \subset H_t^{(1)}(\Omega) \subset L_2(\Omega)$ mit $\mathcal{E}_0^{\infty}(\Omega)$ dicht in $L_2(\Omega)$.

19) Man beachte, daß $\varphi_0 \in H_t^{(2)}(\Omega)$ impliziert: $\Delta \varphi_0 \in L_2(\Omega)$ und $w \varphi_0 \in L_2(\Omega)$ (siehe Gl.(2.23)!).

Wiederum befinden wir uns genau in der bei Stummel (/59, S.53, (1)-(4); S.57, (18)-(19)/) vorausgesetzten Situation ²⁰⁾ und erhalten über die bereits im letzten Abschnitt zitierten Sätze (S.41) folgende Aussagen:

(L1') Das Spektrum und die Eigenlösungen im starken Sinn sind identisch mit dem Spektrum und den Eigenlösungen im schwachen Sinn und haben die in (L1) (S.41) angegebenen Eigenschaften.

(L2') Es gilt die Fredholmsche Alternative:

Ist E kein Eigenwert, so existiert zu jedem $f \in L_2(\Omega)$ eine eindeutige Lösung $\varphi_f \in H_t^{(1)}(\Omega)$ zur Randwertaufgabe (2.143).

Ist $E = E_j \in \mathcal{G}$ ein Eigenwert; so ist die Aufgabe genau dann lösbar, wenn gilt ²¹⁾:

$$(2.144) \quad \langle f | \varphi_{j,\nu} \rangle_\Omega = 0 \quad \text{für alle Eigenvektoren } \{\varphi_{j,\nu} | \nu=1, \dots, N_j\} \text{ zu } E_j$$

In diesem Fall ist die Lösung nur bis auf eine Linearkombination der Eigenlösungen $\varphi_{j,1}, \dots, \varphi_{j,N_j}$ bestimmt.

(L3') Für $E \in \mathcal{G} \setminus \mathcal{G}$ existiert ein Greenscher Operator

$$(2.145) \quad \hat{G}_E : L_2(\Omega) \rightarrow H_t^{(1)}(\Omega)$$

als vollstetige (!) lineare Abbildung derart, daß für $f \in L_2(\Omega)$ die Lösung von (2.143) gegeben ist durch

$$(2.146) \quad \varphi_f = \hat{G}_E f \quad .$$

20) Die Übertragung der hier verwendeten Bezeichnungen in die bei Stummel (/59/) ist gegeben durch: $V := H_t^{(1)}(\Omega)$, $b := B$, $k := \langle . | . \rangle_\Omega$, $H := L_2(\Omega)$, $E := I$; $H^* = L_2(\Omega)$, $l := f$.

21) Im Falle $f = \Delta\varphi_0 + (E-w)\varphi_0$ ist wegen $J_{E_j}(\varphi_0, \varphi_{j,\nu}) = 0$ die Bedingung (2.144) äquivalent zu (2.124); aus demselben Grund hat in diesem Falle die Reihe (2.147) den Wert $-\varphi_0 + \psi_b$, wobei ψ_b durch die Reihe (2.133) dargestellt ist. Der bemerkenswerte Unterschied zwischen beiden Reihenentwicklungen ist jedoch, daß (2.133) punktweise für jedes $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ konvergiert, während (2.147) in der Operatornorm (d.h. gleichmäßig im Argument $f \in L_2(\Omega)$) konvergiert (siehe z.B. /61, Vol.I, thm.VI.13/).

Die Wirkung von $\hat{G}_E$ auf f läßt sich durch die in der Norm von $H_t^{(1)}(\Omega)$ konvergente Reihe ²¹⁾

$$(2.147) \quad \varphi_f = \sum_{j \in \mathbb{N}} \frac{1}{E_j - E} \cdot \frac{\langle \varphi_j | f \rangle_\Omega}{\langle \varphi_j | \varphi_j \rangle_\Omega} \varphi_j$$

darstellen.

(L4') Die Lösungsmenge $\{\varphi_f \mid f \in L_2(\Omega)\}$ bildet den folgenden linearen Unterraum von $H_t^{(1)}(\Omega)$:

$$(2.148) \quad R(\hat{G}_E) := \{\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) \mid \text{Die Linearform } H_t^{(1)}(\Omega) \ni \chi \mapsto J_E(\varphi, \chi) \text{ ist in der } L_2(\Omega)\text{-Norm beschränkt}\}$$

(siehe /59, S.57, (20)/).

Eine starke Lösung ψ_b zu $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ erfüllt daher

$$(2.149) \quad \psi_b \in \varphi_0 + R(\hat{G}_E)$$

Im Gegensatz zum Lösungsraum $R(G_E)$ der schwachen Lösungen gestattet der Raum $R(\hat{G}_E)$ eine Interpretation als Definitionsbereich eines selbstadjungierten linearen Operators H im Hilbertraum $L_2(\Omega)$ ²²⁾, womit eine genaue Charakterisierung der starken Lösungen ermöglicht wird. Als Voraussetzung hierfür benötigt man die Gültigkeit der Ehrlingschen Ungleichung (auf der übrigens auch der erste Teil der Bedingung (B2') beruht):

(B6) Zu jedem $\varepsilon > 0$ gibt es eine Konstante $\kappa(\varepsilon, \Omega) > 0$, sodaß gilt:

$$(2.150) \quad \langle \varphi | \varphi \rangle_\Omega \leq \varepsilon \|\varphi\|_{1, \Omega}^2 + \kappa(\varepsilon, \Omega) \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2 \quad \text{für } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

Der Beweis von (B6) folgt unmittelbar aus (A.4.28).

Zusammen mit den detaillierenden Aussagen in Anhang 5 läßt sich unter Verwendung der bei Stummel (/59, Kap.1, §3.2 und §3.3/) erhaltenen Ergebnisse zeigen:

22) Dies ist eine Konsequenz der bei Stummel (/59, S.65, (17) und S.67, (24)/) angegebenen Kriterien: $R(G_E) \cap \text{Kern}(\text{tr}|_F)$ ist nicht in der Menge der Eigenlösungen von (2.118) enthalten, aber $R(\hat{G}_E) \cap \text{Kern}(I) = \{0\}$ liegt in der Menge der Eigenlösungen von (2.143)!

(L6) Der Lösungsraum des Randwertproblems (2.143) ist unabhängig von der Energie E:

$$(2.151) \quad R(\hat{G}_E) = R(\hat{G}_0) \quad \text{für alle } E \in \mathbb{C},$$

sodaß der affine Unterraum $\varphi_0 + R(\hat{G}_E)$ von $H_t^{(1)}(\Omega)$ (vgl. (2.149)) nur noch (via φ_0) von $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ abhängig ist.

(L7) Es existiert ein dicht definierter selbstadjungierter Operator H in $L_2(\Omega)$ mit Definitionsbereich

$$(2.152) \quad D(H) = R(\hat{G}_0)$$

derart, daß ein $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ das Randwertproblem (2.143) genau dann löst, wenn gilt:

$$(2.153) \quad \varphi \in D(H) \quad \text{und} \quad (H - E)\varphi = f$$

(L8) Das Spektrum von H ist genau die Menge der Eigenwerte σ des Randwertproblems (2.118) oder (2.143). Die Resolvente von H ist (modulo der Einbettung $I : H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$ gerade der Green-sche Operator gemäß (L3')²³⁾: Für $E \in \mathbb{C} \setminus \sigma$ gilt:

$$(2.154) \quad R(E, H) := (H - E)^{-1} = I \circ \hat{G}_E : L_2(\Omega) \rightarrow L_2(\Omega)$$

Die Resolvente ist ein vollstetiger Operator in $L_2(\Omega)$.

(L9) Der Operator H ist die Friedrichsche Fortsetzung (/67, §5.5/) des dicht definierten halbbeschränkten²⁴⁾ symmetrischen Operators $-\Delta + w$ in $L_2(\Omega)$ mit Definitionsbereich

$$(2.155) \quad D(-\Delta + w) := \left\{ \varphi \in \mathcal{C}^2(\overline{\Omega}) \mid \begin{aligned} &\partial_n^\alpha \varphi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \text{ auf } S_t \quad (\alpha=0,1) \\ &\text{und } \mathcal{A} \varphi + \partial_n \varphi = 0 \text{ auf } F \end{aligned} \right\}$$

23) Hieraus gewinnt man das bemerkenswerte Ergebnis, daß die Lösung φ_f von (2.143) als Element von $L_2(\Omega)$ analytisch von E auf der Resolventenmenge $\mathbb{C} \setminus \sigma$ abhängt.

24) Eine untere Schranke ist die Energie $\hat{E}$ gemäß (A.4.36) (siehe z.B. /61, Vol.I, thm.VIII.2/ oder /62, ch.III, thm.6.7/).

d.h. H ist diejenige ausgezeichnete selbstadjungierte Fortsetzung des Differentialoperators $-\Delta + w$, deren Definitionsbereich im energetischen Raum $H_t^{(1)}(\Omega)$ liegt.

(L10) Der Definitionsbereich von H läßt sich charakterisieren durch

$$(2.156) \quad D(H) = \{ \varphi \in W_2^{(2)}(\Omega) \mid \partial_n^\alpha \varphi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \text{ in } L_2(S_t) \ (\alpha=0,1) \\ \text{und } \mathcal{L}\varphi + \partial_n \varphi = 0 \text{ in } L_2(F) \} ,$$

und für $\varphi \in D(H)$ ist

$$(2.157) \quad H\varphi = -\Delta\varphi + w\varphi ,$$

wobei Δ als verallgemeinerte Ableitung aufzufassen ist.

Aus der letzten Aussage können wir wegen (2.149) unter Beachtung von (2.140) und (2.151)-(2.153) folgern, daß starke Lösungen ψ_b des Einzelschichtproblems folgende Regularitätseigenschaften besitzen:

$$(2.158) \quad \psi_b \in W_2^{(2)}(\Omega); \quad (-\Delta + w - E)\psi_b = 0 \text{ in } L_2(\Omega) ;$$

$$(2.159) \quad \partial_n^\alpha (\psi_b)_0 = t \cdot \partial_n^\alpha (\psi_b)_1 \text{ in } L_2(S_t) \quad (\alpha = 0,1) ;$$

$$(2.160) \quad \mathcal{L}\psi_b + \partial_n \psi_b = b \text{ in } H_t^{(1/2)}(F)$$

Insbesondere genügen natürlich die Eigenlösungen ($b=0$) diesen Beziehungen.

Aus der Bestimmungsgleichung (2.142) für die Funktion φ im Ansatz (2.135) läßt sich wegen (L7) und (L8) schließen, daß ψ_b als Element von $L_2(\Omega)$ die Darstellung

$$(2.161) \quad \psi_b = \varphi_0 + R(E, H)(\Delta \varphi_0 + (E - w)\varphi_0) ; \quad (E \notin \mathcal{G})$$

hat, woraus wegen der analytischen Abhängigkeit der Resolvente von E auf $\mathbb{C} \setminus \mathcal{G}$ (siehe Zitate in Fußnote 23) folgt, daß für starke Lösungen die Abbildung

$$(2.162) \quad \mathbb{C} \setminus \mathcal{G} \ni E \mapsto \psi_{b,E} \in L_2(\Omega)$$

ebenfalls analytisch ist.

Selbstverständlich sind starke Lösungen ψ_b auch schwache Lösungen, weil $\psi_b = \varphi_0 + \varphi_f$ mit $f = \Delta\varphi_0 + (E - w)\varphi_0$ wegen (2.141) gerade das Randwertproblem (2.118) löst. Dies hat folgende Konsequenzen:

Die "Parameterdarstellung" (2.125)/(2.126) des Lösungsraumes der schwachen Lösungen liefert auch eine Parametrisierung des Lösungsraumes der starken Lösungen, indem man den Definitionsbereich $H_t^{(-1/2)}(F)$ auf $H_t^{(1/2)}(F)$ einschränkt. Da nach Abschnitt (2.1.2) die Inklusion $H_t^{(1/2)}(F) \hookrightarrow H_t^{(-1/2)}(F)$ stetig ist, folgt, daß die (mit demselben Symbol G_E bezeichnete) Komposition dieser Inklusion mit dem Greenschen Operator (2.125)

$$(2.163) \quad G_E : H_t^{(1/2)}(F) \longrightarrow H_t^{(1)}(\Omega) \quad , \quad b \mapsto \psi_b = G_E b$$

für $E \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ eine stetige lineare Abbildung darstellt.

Insbesondere hängt zu gegebenem $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ die starke Lösung ψ_b nicht von der speziellen Wahl der Funktion φ_0 ab, die als "Aufpunkt" des affinen Raumes (2.149) dient, obgleich natürlich φ_0 keineswegs durch b eindeutig bestimmt ist. Nichtsdestoweniger ist es von Interesse, die Abhängigkeit der Funktion φ im Ansatz (2.135) von φ_0 und b zu untersuchen. Aufgrund der Bestimmungsgleichung (2.141) für φ kann man mit Stummel (/59, S.74-75, (6)-(8)/) und den erläuternden Betrachtungen in Anhang 5 schließen, daß es für $E \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ eine Konstante $C = C(\Omega, \bar{K}_\mu, E, w) > 0$ gibt mit

$$(2.164) \quad \|\varphi\|_{1,\Omega} \leq C (\|\varphi_0\|_{1,\Omega} + \|b\|_{-1/2,F}) \quad ,$$

sodaß also φ in $H_t^{(1)}(\Omega)$ stetig von φ_0 und b abhängt.

Schließlich ergibt sich bezüglich der Randbedingungen (2.159) und (2.160) folgender bemerkenswerter Sachverhalt:

Hat man zu einem vorgegebenen $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ eine schwache Lösung $\psi_b \in H_t^{(1)}(\Omega)$ gefunden, die also nur die wesentliche Randbedingung

" $(\psi_b)_0 = t(\psi_b)_1$ in $L_2(S_t)$ " zu befriedigen braucht (siehe Def.(2.113)), so erfüllt diese Lösung überdies auch die natürlichen Randbedingungen (2.130)

" $\partial_n(\psi_b)_0 = t \cdot \partial_n(\psi_b)_1$ in $L_2(S_t)$ " und " $\Delta \psi_b + \partial_n \psi_b = b$ in $H_t^{(1/2)}(F)$ " (siehe Gl.(2.159)/(2.160)). Wie die folgenden beiden Abschnitte zeigen werden, genügt es daher bei der Approximation einer starken Lösung ψ_b zu $b \in H_t^{(1/2)}(F)$, daß die approximierenden Funktionen nur in $H_t^{(1)}(\Omega)$ zu liegen brauchen; die natürlichen Randbedingungen (2.130) werden dann (in der Approximation "so gut es geht" und im Limes exakt) ganz von selbst befriedigt.

2.3.3 Charakterisierung der Lösungen durch eine Variationsaufgabe

Die Bestimmungsgleichung (2.118) für die Lösungen ψ_b des Einzelschichtproblems läßt sich als Eulersche Gleichung eines Variationsproblems interpretieren. Hierzu betrachten wir mit $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ das Funktional ²⁵⁾

$$(2.165) \quad J : H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}, \quad J(\varphi) := J_E(\varphi, \varphi) - \langle b | \varphi \rangle_F - \langle b | \varphi \rangle_F^*,$$

dessen stationäre Punkte ψ definiert sind durch die Bedingungen (/53, ch.3/)

$$(2.166) \quad J \text{ ist (Fréchet-)differenzierbar bei } \psi \text{ und } DJ(\psi) = \delta J(\psi, \cdot) = 0.$$

Nun ist die erste Variation von J bei ψ gegeben durch

$$(2.167) \quad \delta J(\psi, \chi) = 2\operatorname{Re}(J_E(\psi, \chi) - \langle b | \chi \rangle_F) \quad ; \quad \chi \in H_t^{(1)}(\Omega),$$

und da nach (B1) und (B2) die rechte Seite für alle $\psi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ bezüglich des Arguments χ stetig ist (bzgl. der $\|\cdot\|_{1,\Omega}$ -Norm!), folgt, daß J für alle $\psi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ differenzierbar ist. Somit gilt:

(V1) Die stationären Punkte von J gemäß (2.165) sind identisch mit den (schwachen) Lösungen der Randwertaufgabe (2.16)-(2.18).

25) Das vorliegende Problem ist ein Spezialfall der in /51/ behandelten Problemklasse. Das Funktional J stimmt mit dem in /51, Gl.(A.4.5)/ angegebenen überein (man setze $u:=w:=\wedge$; $f_0^{(0)}:=g_0^{(0)}:=0$; $f_0^{(1)}:=g_0^{(1)}:=b$); da J_E hermitesch ist und $t^*=t^{-1}$, reduziert sich der Variationsausdruck auf ein Funktional, welches nur von der einen Variablen $\varphi = \chi$ abhängt!

Man beachte, daß im allgemeinen die stationären Punkte ψ von J keine Extrema sind; da die zweite Variation (= Diagonale der 2. Ableitung von J)

$$(2.168) \quad \delta^2 J(\psi, \chi) = D^2 J(\psi)(\chi, \chi) = 2J_E(\chi, \chi) \quad (\chi \in H_t^{(1)}(\Omega))$$

gerade durch J_E gegeben ist, können wir mit der Koerzivitätsbedingung (2.122) nur für den (relativ uninteressanten) Engergiebereich $E \leq \hat{E}$ auf die Nicht-Negativität der zweiten Variation schließen, was uns garantiert, daß ein stationärer Punkt ψ das Funktional J minimiert.

Allerdings gibt es im Falle $b = 0$ für die Eigenlösungen des Einzelschichtproblems ein Extremalprinzip:

Der Rayleigh-Quotient

$$(2.169) \quad R(\varphi) := B(\varphi, \varphi) / \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2 \quad \text{für } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

gestattet die Formulierung des bekannten Minimax-Prinzips für symmetrische Eigenwertprobleme (/53, ch.6, §9/; /52, Vol.I, Kap.VI, §4/):

(V2) Seien die Eigenwerte der Randwertaufgabe (2.118) angeordnet in der Form $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots$, wobei mehrfache Eigenwerte ihrer Vielfachheit entsprechend oft auftreten, und sei $(\varphi_j)_{j \in \mathbb{N}}$ die Folge der (bezüglich des energetischen Skalarproduktes $[\cdot, \cdot]$ gemäß (L5) orthonormierten) zugehörigen Eigenlösungen. Dann gilt:

$$(2.170) \quad E_j = \min_{\dim(W)=j} \left(\max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R(\varphi) \right) = \max_{\dim(W)=j-1} \left(\min_{\varphi \in W^\perp \setminus \{0\}} R(\varphi) \right),$$

wobei W einen endlichdimensionalen Teilraum von $H_t^{(1)}(\Omega)$ bezeichnet und

$$(2.171) \quad W^\perp := \{ \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) \mid \langle \varphi | w \rangle_\Omega = 0 \text{ für alle } w \in W \}.$$

Minimum und Maximum werden jeweils angenommen gemäß

$$(2.172) \quad E_j = R(\varphi_j) = \max_{\varphi \in W_j \setminus \{0\}} R(\varphi) = \min_{\varphi \in W_{j-1}^\perp \setminus \{0\}} R(\varphi),$$

wobei $W_0 := \{0\}$ und $W_j := \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_j\}$ für $j \geq 1$ definiert ist.

Der Beweis ergibt sich unter den Voraussetzungen (B1) und (B3)-(B5) mit Stummel (/59, S.92 ff., (50)-(53)).

Schließlich wollen wir noch ein Variationsprinzip für starke Lösungen ($b \in H_t^{(1/2)}(F)$) des Einzelschichtproblems konstatieren. Wir betrachten wieder das Funktional J gemäß (2.165), aber denken uns den Definitionsbereich $H_t^{(1)}(\Omega)$ in $L_2(\Omega)$ eingebettet und mit dessen Norm versehen. Entsprechend dem Ansatz (2.135) suchen wir die stationären Punkte des in $L_2(\Omega)$ dicht definierten Funktionals

$$(2.173) \quad \tilde{J} : \varphi_0 + H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow \mathbb{R}, \quad \tilde{J}(\psi) := J(\psi) \quad .$$

Durch partielle Integration und Beachtung der Randbedingungen für φ_0 ergibt sich für $\psi = \varphi_0 + \varphi$, $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ die Darstellung

$$(2.174) \quad \tilde{J}(\varphi_0 + \varphi) = J_E(\varphi, \varphi) + 2\operatorname{Re} \langle -\Delta \varphi_0 + (w-E)\varphi_0 | \varphi \rangle_{\Omega} + \operatorname{const}(\varphi_0),$$

woraus sich als erste Variation ableitet:

$$(2.175) \quad \delta \tilde{J}(\psi, \chi) = 2\operatorname{Re}(J_E(\varphi, \chi) + \langle -\Delta \varphi_0 + (w-E)\varphi_0 | \chi \rangle_{\Omega})$$

$$(\psi = \varphi_0 + \varphi \quad ; \quad \varphi, \chi \in H_t^{(1)}(\Omega))$$

Definitionsgemäß (/53, ch.3, §3/) ist $\psi \in \varphi_0 + H_t^{(1)}(\Omega)$ genau dann ein stationärer Punkt von $\tilde{J}$, wenn $\delta \tilde{J}(\psi, \cdot)$ eine (bezüglich der $L_2(\Omega)$ -Norm!) stetige Linearform ist und verschwindet ²⁶⁾, was wegen (2.175) genau dann der Fall ist, wenn gilt:

$$(2.176) \quad H_t^{(1)}(\Omega) \ni \chi \mapsto J_E(\varphi, \chi) \text{ ist in der } L_2(\Omega)\text{-Norm beschränkt}$$

$$\text{und } J_E(\varphi, \chi) = -\langle -\Delta \varphi_0 + (w-E)\varphi_0 | \chi \rangle_{\Omega} \text{ für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega) \quad .$$

Durch Vergleich mit (L4') und (2.142) können wir feststellen:

26) Diese Definition der Stationarität leistet dasselbe wie (2.166), ersetzt aber den Begriff des Differentials DJ , für dessen Definition üblicherweise die Offenheit des Definitionsbereiches von J vorauszusetzen ist (/71/), durch den Begriff des Gradienten eines dicht definierten Funktionals (/53, ch.3, §3/).

(V3) Die stationären Punkte von $\tilde{J}$ gemäß (2.173) sind identisch mit den (starken) Lösungen der Randwertaufgabe (2.16)-(2.18).

Es sei angemerkt, daß sich eine Klasse weiterer Stationaritätsprinzipien zur Charakterisierung der Lösungen des Einzelschichtproblems angeben läßt (/51/), wobei die zugrunde liegenden Funktionale J dadurch gekennzeichnet sind, daß deren Definitionsbereich Funktionen einschließt, die auf gewissen in Ω enthaltenen Flächen unstetig sein dürfen ²⁷⁾ und auch die Randbedingungen (2.17)/(2.18) nicht zu erfüllen brauchen (sie müssen nicht einmal der bisher stets als wesentlicher Randbedingung vorausgesetzten Gleichung " $\varphi_0 = t \varphi_1$ auf S_t " genügen!); "zum Ausgleich" müssen diese Funktionen aber in den von diesen Flächen berandeten Gebieten eine größere Regularität als bisher vorausgesetzt besitzen, nämlich zur Klasse $W_2^{(2)}$ gehören. Auf eine ausführliche Darstellung derartiger Variationstechniken sei hier verzichtet; die Spezialisierung der in /51/ betrachteten Situation ist unmittelbar einsichtig, wenn man die Randbedingung (2.17) mit $b \in H_t^{(1/2)}(F)$ in der Form

$$(2.177) \quad \begin{pmatrix} \varphi \\ \partial_n \varphi \end{pmatrix} \in \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix} + U_0(F) \quad ; \quad U_0(F) := \left\{ \begin{pmatrix} f \\ -\mathcal{A}f \end{pmatrix} \mid f \in H_t^{(3/2)}(F) \right\}$$

schreibt und beachtet, daß die Selbstadjungiertheit des Operators $\mathcal{A}$, gerade die als Voraussetzung nachzuweisende Kompatibilitätsbeziehung (/51, equ.(9₅)/) garantiert:

$$(2.178) \quad \int_F (g, -\mathcal{A}g)^* \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f \\ -\mathcal{A}f \end{pmatrix} d^2 r_n = 0 \quad \text{für } f, g \in H_t^{(3/2)}(F)$$

2.3.4 Approximative Lösungen

Die "schwache" Formulierung (2.118) des Einzelschichtproblems bietet den Ausgangspunkt für eine näherungsweise Lösung mit Hilfe der Galerkinschen Methode (/72, ch.II, §3/), bei der man endlichdimensionale Unterräume $V_N \subset H_t^{(1)}(\Omega)$ ($N \in \mathbb{N}$) auswählt und das folgende diskrete Problem betrachtet:

27) Solche Funktionen werden zur Approximation der Lösungen der Schrödingergleichung z.B. im APW-Verfahren (/40/) benutzt.

Finde $\psi_b^{(N)} \in V_N$ mit

$$(2.179) \quad B(\psi_b^{(N)}, \chi) - E \langle \psi_b^{(N)} | \chi \rangle_{\Omega} = \langle b | \chi \rangle_F \quad \text{für alle } \chi \in V_N.$$

Die Folge der Räume V_N kann hierbei im jeweiligen konkreten numerischen Verfahren auf sehr unterschiedliche Weise realisiert sein: Man kann sich beispielsweise V_N als lineare Hülle $\text{span}\{f_1, \dots, f_N\}$ vorgeben, wobei $(f_j)_{j \in \mathbb{N}}$ eine Basis des Hilbertraumes $H_t^{(1)}(\Omega)$ bezeichnet; dies entspricht dem Vorgehen beim Ritzschen Verfahren. Es können aber als V_N auch Räume von völlig anderem Charakter dienen wie z.B. Räume von finiten Elementen (/73/). Wesentlich ist nur, daß die Folge der V_N den energetischen Raum $H_t^{(1)}(\Omega)$ auf folgende Art und Weise approximiert ("interne Approximation"):

(B7) Zu jedem $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ existieren $\chi_N \in V_N$ ($N \in \mathbb{N}$), sodaß für $N \rightarrow \infty$ $\chi_N \rightarrow \chi$ in der $\|\cdot\|_{1,\Omega}$ -Norm konvergiert (oder einer dazu äquivalenten Norm wie z.B. $\sqrt{[\dots]}$ gemäß (2.131)).

Wählt man im Raum V_N eine Basis $\{e_1, \dots, e_n\}$ aus, so wird (2.179) zu folgendem linearen Gleichungssystem äquivalent:

$$(2.180) \quad \sum_{l=1}^n [B(e_k, e_l) - E \langle e_k | e_l \rangle_{\Omega}] \alpha_l^{(N)} = \langle b | e_k \rangle_F^* \quad (k = 1, \dots, n),$$

wobei

$$(2.181) \quad \psi_b^{(N)} = \sum_{l=1}^n \alpha_l^{(N)} e_l.$$

Aufgrund der Voraussetzungen (B1)-(B5) (Abschnitt 2.3.1) gelten für das diskrete Problem (2.179) bzw. (2.180) zu (L1)-(L3) und (L5) sowie (V2) analoge Aussagen (man ersetze $H_t^{(1)}(\Omega)$ jeweils durch V_N); insbesondere existiert zu jedem N eine endliche Folge G_N von reellen Eigenwerten $\hat{E} < E_1^{(N)} \leq E_2^{(N)} \leq \dots$ und zugehörigen Eigenlösungen $\varphi_j^{(N)}$, die den Orthogonalitätsbeziehungen (2.123) und der Vollständigkeitsrelation (2.132) in V_N genügen und die durch ein Minimax-Prinzip in V_N charakterisiert werden können. Für Energien $E \notin G_N$ existiert eine eindeutige Lösung $\psi_b^{(N)}$ zum diskreten Problem (2.179). Die Bedingung (B7) garantiert dann die folgenden Konvergenzsätze:

Für die Eigenwerte gilt:

(A1) Sei $j \in \mathbb{N}$ und $N_0(j)$ derart, daß $\dim V_N \geq j$ für $N \geq N_0(j)$ gilt.

Dann konvergiert die Folge $(E_j^{(N)})_{N \geq N_0(j)}$ von oben gegen E_j . Für die ersten j "exakten" Eigenfunktionen $\varphi_1, \dots, \varphi_j$ zu den "exakten" Eigenwerten $E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_j$ der Randwertaufgabe (2.118) (in der Anordnung gemäß (V2)) gibt es für alle hinreichend großen N ($N \geq N(j) \geq N_0(j)$) eindeutig bestimmte "global approximierende" Funktionen $\bar{\varphi}_1^{(N)}, \dots, \bar{\varphi}_j^{(N)} \in V_N$ (die sogenannten Galerkin-Approximationen 28)) mit

$$(2.182) \quad \|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\| = \inf_{\chi \in V_N} \|\chi - \varphi_i\| \quad (1 \leq i \leq j),$$

$$(2.183) \quad \sum_{i=1}^j \|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\|_{L_2(\Omega)}^2 \leq 1/2 \quad \text{für } N \geq N(j);$$

wobei $\|\cdot\| := \sqrt{[\cdot, \cdot]}$ die energetische Norm nach (L5) ist. Die approximativen Eigenwerte $E_j^{(N)}$ genügen der Abschätzung

$$(2.184) \quad E_j \leq E_j^{(N)} \leq E_j + \frac{\sum_{i=1}^j \|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\|^2}{(1 - (\sum_{i=1}^j \|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\|_{L_2(\Omega)}^2)^{1/2})^2}$$

für alle $N \geq N(j)$.

Man beachte, daß aus Gl.(2.182) wegen (B7) sofort die Konvergenz der Folgen $(\bar{\varphi}_i^{(N)})_{N \geq N(j)}$ in der $\|\cdot\|$ -Norm und damit auch in der $L_2(\Omega)$ -Norm folgt. Selbstverständlich läßt sich mit (2.184) wegen

$\|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\| \leq \|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\|$ (vgl. (2.182)!) auch eine Fehlerabschätzung der Form

$$(2.185) \quad E_j \leq E_j^{(N)} \leq E_j + C(j) \cdot \sum_{i=1}^j \|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\|^2 \quad (N \geq N(j))$$

28) Die Galerkin-Approximation $\bar{\varphi}^{(N)}$ einer Funktion $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ ist die Orthogonalprojektion $\Pi^{(N)}\varphi$ von φ auf V_N bezüglich des Skalarproduktes $[\cdot, \cdot]$.

herleiten, auf der bisweilen Konvergenzbetrachtungen in der physikalischen Fachliteratur aufbauen; da man den Fehler $\|\varphi_i^{(N)} - \varphi_i\|$ aber a-priori nicht kennt, ist dies für die Praxis nicht sehr hilfreich. Hingegen läßt sich für $\|\bar{\varphi}_i^{(N)} - \varphi_i\|$ durch Untersuchung des Diskretisierungsfehlers $\inf\{\|\chi - \varphi\|; \chi \in V_N\} = \|\varphi - \Pi^{(N)}\varphi\|$ für $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ durchaus vorab eine Schranke gewinnen.

Zu den Eigenfunktionen läßt sich feststellen:

(A2) Sei $E_j \in \sigma$ ein exakter Eigenwert der Multiplizität $p + 1$, $p \geq 0$ (die Eigenwerte mögen in der Form $E_{j-1} < E_j = E_{j+1} = E_{j+2} = \dots = E_{j+p} < E_{j+p+1}$ angeordnet sein) und seien $\varphi_1, \dots, \varphi_{j+p}$ zugehörige, bezüglich $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ orthonormierte Eigenfunktionen. Weiterhin sei $N_p(j)$ derart, daß $\dim V_N \geq j + p$ für $N \geq N_p(j)$ gilt. Die approximierenden Eigenlösungen $\varphi_j^{(N)}, \dots, \varphi_{j+p}^{(N)}$ seien für alle $N \geq N_p(j)$ ebenfalls bzgl. $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ orthonormiert. Für $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ sei $P_j^{(N)}\chi$ die $L_2(\Omega)$ -Projektion auf den von $\varphi_j^{(N)}, \dots, \varphi_{j+p}^{(N)}$ aufgespannten "approximativen Eigenraum" gemäß

$$(2.186) \quad P_j^{(N)}\chi := \sum_{i=j}^{j+p} \langle \varphi_i^{(N)} | \chi \rangle_\Omega \varphi_i^{(N)} \quad ;$$

weiterhin seien $\bar{\varphi}_i^{(N)} = \Pi^{(N)}\varphi_i$ die Galerkin-Approximationen ²⁸⁾ von φ_i . Ist φ ein exakter Eigenvektor zu E_j (also eine Linearkombination der $\varphi_j, \dots, \varphi_{j+p}$), so gilt für hinreichend große N ($N \geq N(j) \geq N_p(j)$) mit einer nur von j und p abhängigen positiven Konstanten $K(j, p)$ die Abschätzung

$$(2.187) \quad \|\varphi - P_j^{(N)}\varphi\| \leq K \cdot \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^{1/2} \sum_{i=j}^{j+p} \|\varphi_i - \bar{\varphi}_i^{(N)}\| \quad ;$$

insbesondere konvergiert unter der Bedingung (B7)

$(P_j^{(N)}\varphi)_{N \geq N_p(j)}$ gegen φ in der $H_t^{(1)}(\Omega)$ -Norm.

Die etwas umständliche Formulierung dieses Satzes rührt daher, daß wir im allgemeinen von den approximierenden Eigenlösungen $\varphi_i^{(N)}$ selbst keine Konvergenz erwarten dürfen; selbst im Falle, daß keine Entartung vorliegt ($p = 0$), sind die normierten Eigenvektoren $\varphi_j^{(N)}$ und φ_j ja nur bis auf einen Phasenfaktor eindeutig bestimmt, über den noch z.B. gemäß $\|\varphi_j^{(N)} - \varphi_j^{(N+1)}\| = \text{Min!}$ verfügt werden kann. So kann man für einfache Eigenwerte aus (2.187) tatsächlich eine Fehlerabschätzung für die Eigenvektoren selbst gemäß

$$(2.188) \quad \|\varphi_j - \varphi_j^{(N)}\| \leq K \|\varphi_j - \bar{\varphi}_j^{(N)}\|$$

bekommen. Im Entartungsfall ($p \geq 1$) konvergiert hingegen nur der approximative Eigenraum (d.h. die lineare Hülle derjenigen Eigenvektoren $\varphi_i^{(N)}$, deren Eigenwerte $E_i^{(N)}$ gegen E_j streben) gegen den exakten Eigenraum, wobei die Konvergenzgeschwindigkeit durch den Diskretisierungsfehler $\|\varphi - \Pi^{(N)}\varphi\|$ bestimmt wird.

Für das inhomogene Randwertproblem gilt:

(A3) Sei $E \notin \mathcal{E}$ und $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$. Sei N_0 so groß, daß für $N \geq N_0$ die Energie E nicht mehr in den approximativen Spektren $\mathcal{E}_N$ vorkommen kann, sodaß die diskreten Lösungen $\psi_b^{(N)}$ existieren. Dann konvergiert $(\psi_b^{(N)})_{N \geq N_0}$ gegen die exakte Lösung ψ_b in der $H_t^{(1)}(\Omega)$ -Norm.

Zum Beweis der Konvergenzsätze (A1) und (A2) kann man nach einer einfachen Modifikation des Ausgangsproblems unmittelbar auf Standardabschätzungen zurückgreifen (/74/; /75/; /76/); für die Aussage (A3) jedoch sind über die übliche Argumentation (Lemma von Céa (/72/)) hinaus einige zusätzliche Überlegungen erforderlich, die in Anhang 6 näher expliziert werden.

2.4 Weitere Eigenschaften des Spektrums des Einzelschicht-Hamiltonoperators

2.4.1 Die Abhängigkeit der Energieeigenwerte von $\mathcal{A}_\alpha$.

Nachdem mit (L1), (L1') und (L8) das Spektrum des Einzelschichtproblems für jedes Element der Schar $\mathcal{A} = \mathcal{A}_\alpha$ (siehe (2.112)) hinreichend charakterisiert ist, bleibt noch zu klären, wie sich die Energieeigenwerte $E_j = E_j(\alpha)$ mit dem Scharparameter α ändern. Hierzu stellen wir zunächst fest, daß die Schar von Sesquilinearformen $B = B_\alpha$ (vgl. (2.119)) für $0 \leq \alpha < \infty$ monoton von α abhängt in folgendem Sinn: Es gilt offenkundig für $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$

$$(2.189) \quad B_{\alpha_2}(\varphi, \varphi) - B_{\alpha_1}(\varphi, \varphi) = (\alpha_2 - \alpha_1) \cdot \|\varphi\|_{1/2, F}^2, \quad ,$$

sodaß folgt:

$$(2.190) \quad B_{\alpha_1}(\varphi, \varphi) \leq B_{\alpha_2}(\varphi, \varphi) \quad \text{für} \quad \alpha_1 < \alpha_2 \quad ; \quad \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) .$$

Seien nun die Eigenwerte $E_j(\alpha)$ und die zugehörigen Eigenlösungen $\varphi_j(\alpha)$ in der bei (V2) beschriebenen Form angeordnet ($E_1(\alpha) \leq E_2(\alpha) \leq \dots$); mit der Definition

$$(2.191) \quad W_j(\alpha) := \text{span} \{ \varphi_1(\alpha), \dots, \varphi_j(\alpha) \} \quad ; \quad W_0(\alpha) := \{0\}$$

führt das Minimax-Prinzip (2.170)-(2.172) wegen (2.190) für $0 \leq \alpha_1 < \alpha_2 < \infty$ unmittelbar auf die Ungleichung

$$\begin{aligned} (2.192) \quad E_j(\alpha_1) &= \min \{ R_{\alpha_1}(\varphi) \mid \varphi \in W_{j-1}^\perp(\alpha_1) \setminus \{0\} \} \leq \\ &\leq \min \{ R_{\alpha_2}(\varphi) \mid \varphi \in W_{j-1}^\perp(\alpha_1) \setminus \{0\} \} \leq \\ &\leq \max_{\dim W = j-1} \left(\min_{\varphi \in W^\perp \setminus \{0\}} R_{\alpha_2}(\varphi) \right) = E_j(\alpha_2) , \end{aligned}$$

sodaß also für alle $j \in \mathbb{N}$ gilt:

$$(2.193) \quad [0, \infty) \ni \alpha \mapsto E_j(\alpha) \in \mathbb{R} \quad \text{ist monoton steigend.}$$

(Man vergleiche zur Illustration mit dem Fall freier Elektronen (Fig.A.5.1)!))

Des weiteren stellen wir fest, daß für $\alpha \in D := \{z \in \mathbb{C} ; \operatorname{Re}(z) > 0\}$ die Schar der auf $L_2(\Omega)$ dicht definierten Sesquilinearformen $(B_\alpha)_{\alpha \in D}$ eine holomorphe Familie vom Typ (a) im Sinne von Kato (/62,ch.VII,§4.2/) darstellt; dies bedeutet:

i) Für jedes $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ ist $D \ni \alpha \mapsto B_\alpha(\varphi, \varphi)$ eine holomorphe Funktion, weil linear in α .

ii) Für jedes $\alpha \in D$ ist der Wertebereich

$$(2.194) \quad \Theta(B_\alpha) := \{z \in \mathbb{C} \mid z = B_\alpha(\varphi, \varphi), \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega), \|\varphi\|_{L_2(\Omega)} = 1\}$$

im Sektor $|\arg(z - \hat{E})| \leq \vartheta$ mit $0 \leq \vartheta := |\arg(\alpha)| < \frac{\pi}{2}$ enthalten; denn nach (A.4.32) ist

$$(2.195) \quad \operatorname{Re}(B_\alpha(\varphi, \varphi)) \geq \hat{E} \langle \varphi | \varphi \rangle_\Omega \quad \text{für } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

und

$$(2.196) \quad |\operatorname{Im}(B_\alpha(\varphi, \varphi))| \leq \frac{|\operatorname{Im} \alpha|}{\operatorname{Re} \alpha} \operatorname{Re}(B_\alpha(\varphi, \varphi) - \hat{E} \langle \varphi | \varphi \rangle_\Omega) \quad (\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega))$$

(siehe /62,ch.VI, equ.(1.14)/).

iii) Der Definitionsbereich $H_t^{(1)}(\Omega)$ von B_α ist unabhängig von α .

iv) B_α ist abgeschlossen, weil $\operatorname{Re}(B_\alpha - \hat{E} \langle . | . \rangle_\Omega) = [\dots]$ als Skalarprodukt des energetischen Raumes $H_t^{(1)}(\Omega)$ es ist (siehe /62,ch.VI,§1.3/).

Die von der Schar $(B_\alpha)_{\alpha \in D}$ erzeugte Schar von Hamiltonoperatoren $(H_\alpha)_{\alpha \in D}$ (vgl. (L7)-(L10); die Erweiterung auf komplexe α ist unproblematisch, siehe /62,ch.VI, thm.2.7/) ist dann eine selbstadjungierte holomorphe Familie vom Typ (B) im Sinne von Kato (/62,ch.VII,§3.1 und §4.2/); nach (L8)

besitzt diese Familie überdies kompakte Resolventen, sodaß wir mit Kato (/62, ch.VII, §4.7 und §3.5/) über die Eigenwerte $E_j(\alpha)$ und die Eigenfunktionen $\varphi_j(\alpha)$ folgende Aussagen erhalten:

Es gibt eine Folge von auf der positiven reellen Halbachse definierten reellwertigen analytischen Funktionen $\tilde{E}_j(\alpha)$ ($j \in \mathbb{N}$) und $L_2(\Omega)$ -wertigen analytischen Funktionen $\tilde{\varphi}_j(\alpha)$ ($j \in \mathbb{N}$) mit der Eigenschaft, daß für $0 < \alpha < \infty$ die $\tilde{E}_j(\alpha)$ gerade die (ihrer Vielfachheit entsprechend oft gezählten) Eigenwerte des Einzelschichtproblems sind und die Funktionen $\tilde{\varphi}_j(\alpha)$ eine Orthonormalbasis (in $L_2(\Omega)$!) von zugehörigen Eigenlösungen bilden. Die Eigenwerte $E_j(\alpha)$ in der (V2) entsprechenden Anordnung stimmen stückweise auf Teilintervallen $\alpha_1 \leq \alpha \leq \alpha_{1+1}$ mit der jeweils geeignet umindizierten Folge $\tilde{E}_j(\alpha)$ überein in der Weise, daß die $E_j(\alpha)$ überall stetige und stückweise analytische Funktionen in α sind, wobei man unter Umständen an einer Stelle $\alpha = \alpha_1$ (bei entarteten Eigenwerten) vom Graph einer (überall analytischen) Funktion $\tilde{E}_j(\alpha)$ auf den einer anderen überwechselt, wenn sich die Graphen an dieser Stelle schneiden.

Die Ableitungen $\frac{\partial \tilde{E}_j}{\partial \alpha}$ (und damit $\frac{\partial E_j}{\partial \alpha}$, wo E_j analytisch ist) lassen sich aufgrund des obigen Analytizitätssatzes durch Differenzieren der Beziehung (2.172) folgendermaßen ausdrücken:

$$(2.197) \quad \frac{\partial \tilde{E}_j}{\partial \alpha} = 2\operatorname{Re} [B_\alpha(\tilde{\varphi}_j(\alpha), \frac{\partial \tilde{\varphi}_j}{\partial \alpha}(\alpha))] + \|\tilde{\varphi}_j(\alpha)\|_{1/2, F}^2$$

(man beachte, daß nach (L4') $B_\alpha(\tilde{\varphi}_j(\alpha), \cdot)$ ein stetiges Funktional auf $L_2(\Omega)$ darstellt und daher die rechte Seite wohldefiniert ist!).

Wegen

$$(2.198) \quad B_\alpha(\tilde{\varphi}_j(\alpha), \frac{\partial \tilde{\varphi}_j}{\partial \alpha}(\alpha)) = \tilde{E}_j(\alpha) \langle \tilde{\varphi}_j(\alpha) | \frac{\partial \tilde{\varphi}_j}{\partial \alpha}(\alpha) \rangle_\Omega$$

und der $L_2(\Omega)$ -Normiertheit von $\tilde{\varphi}_j(\alpha)$ verschwindet der erste Term in (2.197), sodaß wir folgende spezielle Form des Hellmann-Feynman-Theorems erhalten (/77;/78/; vgl. auch /62, ch.VII, equ.4.56/):

$$(2.199) \quad \frac{\partial \tilde{\xi}_j}{\partial \alpha}(\alpha) = \|\tilde{\varphi}_j(\alpha)\|_{1/2,F}^2 \quad \text{für } 0 < \alpha < \infty \quad (j \in \mathbb{N})$$

Da die rechte Seite nicht-negativ ist, sind auch die Funktionen $\tilde{\xi}_j(\alpha)$ mit α monoton wachsend (vgl. (2.193)).

Spezielles Interesse verdienen noch die Grenzfälle $\alpha \rightarrow 0_+$ und $\alpha \rightarrow \infty$, welche den Randbedingungen

$$(2.200) \quad \frac{\partial}{\partial n} \psi_X = 0 \quad \text{auf } F_X \quad (X=R, L)$$

und

$$(2.201) \quad \psi_X = 0 \quad \text{auf } F_X \quad (X=R, L)$$

entsprechen. Nun war der Fall $\alpha = 0$ ohnehin in der in Abschnitt 2.3 dargestellten Lösungstheorie mit eingeschlossen, sodaß man für $\alpha \rightarrow 0$ keine Besonderheiten im Spektrum erwarten wird. In der Tat läßt sich die selbstadjungierte holomorphe Familie $(B_\alpha)_{\alpha \in D}$ auf eine endliche Kreisscheibe um $\alpha = 0$ fortsetzen: Aus den Bedingungen (B2) (vgl. (A.4.30)) und (B5) (vgl. (2.122)) folgt sofort die relative Beschränktheit der Sesquilinearform $(\cdot | \cdot)_{1/2,F}$ durch B_0 gemäß

$$(2.202) \quad (\varphi | \varphi)_{1/2,F} \leq \frac{k^2}{\beta} (B_0(\varphi, \varphi) - \hat{E} \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2) \quad \text{für alle } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega).$$

Nach einem Kriterium von Kato (/62, ch.VII, thm.4.8/) ²⁹⁾ ist dann B_α auf der Kreisscheibe $|\alpha| < \beta k^{-2}$ eine selbstadjungierte holomorphe Familie vom Typ (a), weshalb der oben zitierte Analytizitätssatz sogar auf dem reellen Halbstrahl $-\beta k^{-2} < \alpha < \infty$ gilt.

Es läßt sich sogar zeigen, daß B_α auf der aufgeschnittenen komplexen Ebene $\mathcal{R} := \mathbb{C} \setminus (-\infty, -\beta k^{-2}]$ eine holomorphe Familie ist, die eine holomorphe Familie von Hamiltonoperatoren H_α erzeugt, welche alle ein diskretes Spektrum von Eigenwerten endlicher Vielfachheit besitzen. Die Eigenwerte lassen sich lokal als Zweige analytischer Funktionen mit schlimmstenfalls algebraischen Singularitäten darstellen, ändern sich also mit α wenigstens

29) Man identifiziere $\mathcal{A}^{(0)} = B_0$, $\mathcal{A}^{(1)} = (\cdot | \cdot)_{1/2,F}$, $D(\mathcal{A}^{(0)}) = D(\mathcal{A}^{(1)}) = H_t^{(1)}(\Omega)$, $a = -\hat{E} k^2 \beta^{-1}$, $b = k^2 \beta^{-1}$

stetig; einfache Eigenwerte hängen analytisch von α ab und man kann die zugehörigen Eigenvektoren so wählen, daß diese es ebenfalls tun. Für eine ausführlichere Diskussion dieses Gegenstandes sei auf Anhang 7 verwiesen.

Die Untersuchung des Verhaltens der Hamiltonoperatoren H_α für $\alpha \rightarrow \infty$ hingegen erfordert etwas Mühe, was schon deshalb nicht verwunderlich ist, weil B_α für $\alpha = \infty$ keinen Sinn macht. Stattdessen muß man bei Vorgabe der Randbedingung (2.201) die Sesquilinearform $\tilde{B}_0$ betrachten, die man als Einschränkung der Form B_0 auf den folgenden Teilraum von $H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$ als Definitionsbereich erhält:

$$(2.203) \quad H_{t,0}^{(1)}(\Omega) := \{ \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) \mid \varphi_R = \varphi_L = 0 \}$$

Als Nullstellengebilde der stetigen Spurabbildung (A.4.1) ist $H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$ ein Unterhilbertraum von $H_t^{(1)}(\Omega)$; er ist gerade der energetische Raum des symmetrischen Operators $(-\Delta + w)_{DIt}$ mit Definitionsbereich $D(-\Delta + w)_{DIt}$ wie in Def.(2.155), wobei aber die Ausstrahlungsbedingung (2.17) durch die Dirichletsche Randbedingung (2.201) ersetzt ist. Daß an die Stelle des energetischen Raumes $H_t^{(1)}(\Omega)$ im Falle $\alpha < \infty$ der Raum $H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$ im Falle $\alpha = \infty$ tritt, resultiert aus der Tatsache, daß " $\varphi_X = 0$ auf F_X " bei der Vervollständigung von $D(-\Delta + w)_{DIt}$ unter B_0 eine stabile Randbedingung ist und daher eine wesentliche Randbedingung des Einzelschichtproblems darstellt, während " $\bigwedge \varphi_X + \partial_n \varphi_X = 0$ auf F_X " als nichtstabile Randbedingung bei der Vervollständigung verschwindet, dafür aber als natürliche Randbedingung durch Addition des Termes $\alpha(\cdot, \cdot)_{1/2,F}$ zu B_0 berücksichtigt wird. Dies ist im übrigen auch ein Grund dafür, daß $(B_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{D}}$ nicht als holomorphe Familie vom Typ (a) in den Punkt $\alpha = \infty$ hinein fortgesetzt werden kann.

Wir wollen uns aber im folgenden vergewissern, daß die von B_α erzeugten Hamiltonoperatoren H_α für $\alpha \rightarrow \infty$ wenigstens stetig gegen einen Hamiltonoperator H_∞ gehen. Geben wir uns also eine monoton wachsende Folge

$$(2.204) \quad 0 \leq \alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \alpha_3 \dots < \infty$$

mit $\alpha_n \rightarrow \infty$ für $n \rightarrow \infty$ vor. Dann ist wegen (2.190) $(B_{\alpha_n})_{n \in \mathbb{N}}$ eine monoton wachsende Folge von in $L_2(\Omega)$ dicht definierten abgeschlossenen hermiteschen Sesquilinearformen, die wegen (B5) von unten durch $\hat{E}$ beschränkt

ist und von oben durch die mit denselben Eigenschaften ausgestattete Sesquilinearform $\tilde{B}_0$ majorisiert wird in dem Sinne, daß gilt:

$$(2.205) \quad D(\tilde{B}_0) = H_{t,0}^{(1)}(\Omega) \subset D(B_{\alpha_n}) = H_t^{(1)}(\Omega)$$

$$(2.206) \quad B_{\alpha_n}(\varphi, \varphi) = \tilde{B}_0(\varphi, \varphi) \quad \text{für alle } \varphi \in D(\tilde{B}_0) = H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$$

Nach einem Satz von Kato (/62, ch.VIII, §3.4/) konvergieren dann die zugehörigen Hamiltonoperatoren H_{α_n} im Sinne starker Resolventenkonvergenz (/62, ch.VIII, §1.1/) gegen einen selbstadjungierten Operator H_∞ mit unterer Schranke $\hat{E}$; dessen zugehörige hermitesche Sesquilinearform B_∞ mit Definitionsbereich ($=$ energetischer Raum von H_∞)

$$(2.207) \quad D(B_\infty) = D((H_\infty - \hat{E})^{1/2})$$

besitzt für alle $\varphi, \chi \in D(B_\infty)$ die Darstellung

$$(2.208) \quad B_\infty(\varphi, \chi) = \langle (H_\infty - \hat{E})^{1/2} \varphi | (H_\infty - \hat{E})^{1/2} \chi \rangle_\Omega + \hat{E} \langle \varphi | \chi \rangle_\Omega$$

(vgl. /62, ch.VI, prob.2.25/) und hat folgende Eigenschaften:

$$(2.209) \quad D(B_\infty) \subset D(B_{\alpha_n}) = H_t^{(1)}(\Omega)$$

$$(2.210) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} B_{\alpha_n}(\varphi, \chi) = B_\infty(\varphi, \chi) \quad \text{für } \varphi, \chi \in D(B_\infty)$$

Hiermit lassen sich nach einigen Zwischenüberlegungen (siehe Anhang 7) sowohl der Raum $D(B_\infty)$ als auch B_∞ identifizieren als

$$(2.211) \quad D(B_\infty) = H_{t,0}^{(1)}(\Omega) \quad ; \quad B_\infty = \tilde{B}_0 \quad ,$$

sodaß als H_∞ - wie zu vermuten war - der von $\tilde{B}_0$ erzeugte Hamiltonoperator ist, dessen genaue Charakterisierung wir nun völlig analog zum Vorgehen in Abschnitt 2.3 gewinnen können:

Sein Definitionsbereich ist gegeben durch

$$(2.212) \quad D(H_\infty) = \{ \varphi \in W_2^{(2)}(\Omega) \mid \partial_n^\alpha \varphi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \text{ in } L_2(S_t) \ (\alpha=0,1) \\ \text{und } \varphi|_F = 0 \text{ in } L_2(F) \}$$

und für $\varphi \in D(H_\infty)$ gilt (2.157). Im übrigen bekommen wir zu (L1), (L1')-(L3'), (L6)-(L9), (V2) und (A1)-(A2) analoge Aussagen, wobei die Randbedingung auf F und der energetische Raum wie oben beschrieben zu substituieren sind; insbesondere besitzt H_∞ ebenfalls ein diskretes Spektrum $\mathcal{G}_\infty$ von Eigenwerten endlicher Vielfachheit.

Das asymptotische Verhalten der Eigenwerte und Eigenräume für $\alpha \rightarrow \infty$ läßt sich nur mit Einschränkungen angeben: Einerseits wissen wir bereits, daß die Eigenwerte $E_j(\alpha)$ stetig und monoton mit α wachsen; darüberhinaus sind sie von oben beschränkt, wie man mit Hilfe des Minimax-Prinzips (V2) sofort erkennt:

$$(2.213) \quad E_j(\alpha) = \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_\alpha(\varphi) \mid W \subset H_t^{(1)}(\Omega), \dim W = j \right\} \leq \\ \leq \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_\alpha(\varphi) \mid W \subset H_{t,0}^{(1)}(\Omega), \dim W = j \right\} = \\ = \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_0(\varphi) \mid W \subset H_{t,0}^{(1)}(\Omega), \dim W = j \right\} = E_j(\infty)$$

Folglich konvergiert $E_j(\alpha)$ für $\alpha \rightarrow \infty$ gegen eine Grenzenergie $\bar{E}_j(\infty)$. Andererseits können wir aus der Tatsache, daß die Hamiltonoperatoren H_α im Sinne starker Resolventenkonvergenz gegen H_∞ streben, schließen, daß jeder Eigenwert $E_j(\infty) \in \mathcal{G}_\infty$ mit einem Element der Folge $(\bar{E}_k(\infty))_{k \in \mathbb{N}}$ übereinstimmt (vgl. /61, Vol. I, thm. VIII.24/ und /62, ch. VIII, thm. 1.14/), d.h. das Spektrum $\mathcal{G}_\alpha$ kann im Limes $\alpha \rightarrow \infty$ nicht expandieren. Könnte man zeigen, daß die Resolvente $R(H_\alpha, E)$ sogar in der Operatornorm gegen $R(H_\infty, E)$ konvergiert, wäre auch garantiert, daß keine Kontraktion des Spektrums eintreten kann und jeder Wert $\bar{E}_j(\infty)$ in $\mathcal{G}_\infty$ vorkommt; in diesem Fall würde dann auch die Summe der Eigenprojektoren zu denjenigen Eigenwerten $E_k(\alpha)$, welche gegen $E_j(\infty)$ streben, in der Operatornorm gegen den Eigenprojektor zu $E_j(\infty)$ konvergieren:

$$(2.214) \quad \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \sum_{|E_k(\alpha) - E_j(\infty)| < \varepsilon} |\varphi_k(\alpha) \rangle \langle \varphi_k(\alpha)| = \sum_{E_k(\infty) = E_j(\infty)} |\varphi_k(\infty) \rangle \langle \varphi_k(\infty)|$$

(wobei ε derart gewählt ist, daß $[E_j(\infty) - \varepsilon, E_j(\infty) + \varepsilon] \cap \mathfrak{E}_\infty = \{E_j(\infty)\}$), d.h. bei nicht-entartetem $E_j(\infty)$ kann man einen Eigenvektor $\varphi_k(\alpha)$ zu $E_k(\alpha)$ so wählen, daß $\varphi_k(\alpha) \rightarrow \varphi_j(\infty)$ in $L_2(\Omega)$, wenn $E_k(\alpha) \rightarrow E_j(\infty)$. Unter den vorliegenden Voraussetzungen gibt es zwar kein generelles Kriterium, wann (2.214) eintritt, doch läßt sich mit Kato (/62, ch.VIII, §1.4 und §4.5/) wenigstens eine hinreichende Bedingung dafür angeben: Ist die Summe der Vielfachheiten derjenigen Eigenwerte $E_k(\alpha) \in \mathfrak{E}_\alpha$, die gegen einen gegebenen Eigenwert $E_j(\infty) \in \mathfrak{E}_\infty$ konvergieren, für hinreichend große α nicht größer als die Vielfachheit von $E_j(\infty)$, so ist (2.214) wahr, wobei genau so viele $E_k(\alpha)$ gegen $E_j(\infty)$ streben, wie dessen Vielfachheit angibt.

Zusammenfassend können wir also festhalten, daß durch Variation des Parameters α in $[0, \infty]$ zwischen dem zur Neumannschen Randbedingung (2.200) gehörenden und dem zur Dirichletschen Randbedingung (2.201) gehörenden Hamiltonoperator interpoliert wird in dem Sinne, daß deren Resolventen und - abgesehen von der genannten Einschränkung - deren Spektren und Eigenräume stetig interpoliert werden.

Anzumerken bleibt die für konkrete numerische Rechnungen wichtige Tatsache, daß die monotone Abhängigkeit der Eigenwerte $E_j(\alpha)$ von α dazu benutzt werden kann, den Abstand $\Delta(E, \alpha)$ zwischen einer vorgegebenen Energie E und dem Spektrum $\mathfrak{E}_\alpha$ zu maximieren, wodurch die Konvergenzgeschwindigkeit des in Abschnitt 2.3.4 dargestellten Galerkin-Verfahrens optimiert werden kann (siehe Anhang 6; man beachte, daß bei (A.6.6) stets $2\delta(E) \leq \Delta(E, \alpha)$ gilt und die Konvergenzgeschwindigkeit nach (A.6.12)-(A.6.15) durch $\delta(E)^{-2}$ bestimmt wird!).

2.4.2 Zusammenhang mit der reellen Bandstruktur (Einschließungseigenschaft)

Die Tatsache, daß die Eigenwerte $E_j(\alpha)$ über der positiven α -Achse Energiebänder ähnlich einer eindimensionalen Bandstruktur bilden - wenn auch von viel einfacherer Struktur - erweckt die Frage, ob zwischen den Spektren des Einzelschichtproblems und der reellen Bandstruktur eines unendlich ausgedehnten Kristalls, der durch periodische Wiederholung einer solchen Einzelschicht erzeugt wird, ein Zusammenhang besteht. Die Antwort ist positiv; es lassen sich in der Tat aus der Kenntnis der Intervalle $[E_j(0), E_j(\infty)]$, die ja im Falle eines stabilen ³⁰⁾ Eigenwertes $E_j(\infty)$ mit dem Abschluß des Wertebereiches $\{E_j(\alpha) \mid \alpha \geq 0\}$ übereinstimmen, Rückschlüsse auf die Energiebänder $\varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$ gewinnen. Letztere sind die Eigenwerte des homogenen Randwertproblems (2.118) bzw. (2.143), wobei aber die Randbedingung (2.17) durch eine auf folgende Weise, ähnlich zu (2.18) definierte Blochbedingung ersetzt wird:

Wir erweitern $S_t = \bigcup_{k=1}^M F_{k,1}$ um die Randfläche $F_{0,1} := F_L$ und setzen

$$F_{0,0} := F_R = \vec{T}_0 + F_{0,1} \text{ mit } \vec{T}_0 := d \cdot \vec{e}_z; d := z_R - z_L \text{ (siehe Fig. 2.1.b).}$$

Für $\psi \in \mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega})$ werden die Randwerte $\partial_z^\alpha \psi_j$ ($\alpha, j = 0, 1$) wie in Def. (2.12)/(2.13) (mit $\vec{n} = -\vec{e}_z$) definiert und dann (via Spurabbildung) auch für $\psi \in W_2^{(\alpha+1)}(\Omega)$ erklärt. Der unendlich ausgedehnte Kristall wird aus der Einzelschicht $\mathcal{L}$ dadurch erzeugt, daß diese durch Translation um Vielfache eines Vektors $\vec{a}_3$ mit

$$(2.215) \quad \vec{a}_{3\perp} := \vec{a}_3 \cdot \vec{e}_z = d = z_R - z_L$$

periodisch wiederholt wird. Der Kristall besitzt dann die Translationssymmetrie des Raumgitters (/48, S.35 ff./)

$$(2.216) \quad G_3 = G_2 \oplus \mathbb{Z} \vec{a}_3 = \mathbb{Z} \vec{a}_1 \oplus \mathbb{Z} \vec{a}_2 \oplus \mathbb{Z} \vec{a}_3, \quad ,$$

dessen erste Brillouinzone (/48, S.86 ff/) wir mit BZ_1 bezeichnen. Die Klassifikation der Lösungen der Schrödingergleichung im Kristall nach den irreduziblen Darstellungen der Translationsgruppe G_3 (/49/) bedeutet,

30) Dies bedeutet, daß (2.214) erfüllt ist.

diese der Blochbedingung

$$(2.217) \quad \psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\vec{R}} \psi(\vec{r}) \quad \text{für } \vec{R} \in G_3, \vec{r} \in \mathbb{R}^3$$

mit einem (reellen) Ausbreitungsvektor $\vec{k} \in BZ_1$ zu unterwerfen. Bei der Reduktion auf die Elementarsäule Ω führt dies auf die Randbedingung ³¹⁾

$$(2.218) \quad \partial_z^\alpha \psi_0 = t_0 T \partial_z^\alpha \psi_1 \quad \text{in } L_2(F_{0,1}) \quad (\alpha = 0, 1);$$

hierbei ist $T = T(\vec{a}_{3\parallel})$ der (unitäre) Translationsoperator

$$(2.219) \quad T(\vec{a}_{3\parallel}) : L_2(Z) \longrightarrow L_2(Z); \quad T(\vec{a}_{3\parallel})u(\vec{r}_{\parallel}) := e^{i\vec{k}_{\parallel}\vec{R}} u(\vec{r}_{\parallel} - \vec{a}_{3\parallel} - \vec{R})$$

($\vec{a}_{3\parallel} = \vec{a}_3 - d\vec{e}_z$ ist die Komponente von $\vec{a}_3$ parallel zu Z ; falls $\vec{r}_{\parallel} - \vec{a}_{3\parallel}$ nicht in Z liegt, ist es mittels $\vec{R} \in G_2$ auf Z zu reduzieren) und t_0 der Übertragungsfaktor

$$(2.220) \quad t_0 := \exp(i\vec{k}\vec{a}_3) = \exp(i\vec{k}_{\parallel}\vec{a}_{3\parallel}) \exp(i\vec{k}_{\perp}d)$$

(siehe Fig. 2.2).

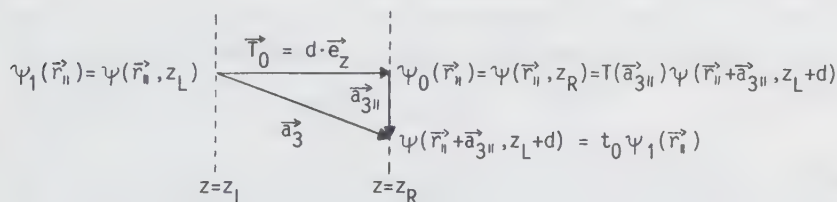


Fig. 2.2: Illustration zur 3-D-Blochbedingung

Die in Abschnitt 2.3 dargestellte Lösungstheorie gilt in modifizierter Form auch für Blochlösungen; wir haben hierbei das homogene Randwertproblem (2.118) mit $b = 0$ bzw. (2.143) mit $f = 0$ zu betrachten, den Grundraum $H_t^{(1)}(\Omega)$ durch den Teilraum

$$(2.221) \quad K_t^{(1)}(\Omega) := \{ \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) \mid \varphi_0 = t_0 T \varphi_1 \quad \text{in } L_2(F_{0,1}) \}$$

31) Das Auftreten des Operators T läßt sich vermeiden, indem man Ω durch die schiefwinklige Elementarsäule $\Omega' := Z + (0,1)\vec{a}_3$ ersetzt (vgl. /51, §4.2/); wir wollen aber aus Konsistenzgründen an Ω festhalten.

zu substituieren und die Sesquilinearform B_α durch $B_{\vec{k}}$, definiert als Einschränkung von B_0 auf $K_t^{(1)}(\Omega)$, zu ersetzen. Als Kern der auf $H_t^{(1)}(\Omega)$ stetigen Abbildung $\text{tr}|_{F_R} - t_0 T \cdot \text{tr}|_{F_L}$ ist $K_t^{(1)}(\Omega)$ ein Unterhilbertraum von $H_t^{(1)}(\Omega)$; er ist gerade der energetische Raum des symmetrischen halbbeschränkten Operators $(-\Delta + w)_{\text{Bch}}$ mit Definitionsbereich $D(-\Delta + w)_{\text{Bch}}$ wie in Def.(2.155), wobei aber die Ausstrahlungsbedingung (2.17) durch die Blochbedingung (2.218) ersetzt wird³²⁾. Daß sich durch diese Abänderung der Randbedingung auf F der energetische Raum von $H_t^{(1)}(\Omega)$ auf $K_t^{(1)}(\Omega)$ verkleinert, rührt daher, daß die Randbedingung " $\varphi_0 = t_0 T \varphi_1$ auf $F_{0,1}$ " bei der Vervollständigung von $D(-\Delta + w)_{\text{Bch}}$ unter B_0 stabil ist und daher als wesentliche Randbedingung in die Charakterisierung des Definitionsbereiches der Sesquilinearform $B_{\vec{k}}$ eingeht; hingegen ist " $\partial_z \varphi_0 = t_0 T \partial_z \varphi_1$ auf $F_{0,1}$ " bei der Vervollständigung nicht stabil und stellt eine natürliche Randbedingung dar.

Als in $L_2(\Omega)$ dicht definierte abgeschlossene hermitesche halbbeschränkte Form erzeugt $B_{\vec{k}}$ einen selbstadjungierten Hamiltonoperator $H_{\vec{k}}$ (/62, ch.VI, thm.2.6/), der sich durch analoges Vorgehen wie in Abschnitt 2.3 charakterisieren läßt. Sein Definitionsbereich ist

$$(2.222) \quad D(H_{\vec{k}}) = \left\{ \varphi \in W_2^{(2)}(\Omega) \mid \begin{aligned} &\partial_n^\alpha \varphi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \quad \text{auf} \quad \bigcup_{l=1}^M F_{l,1} \\ &\text{und} \quad \partial_z^\alpha \varphi_0 = t_0 T \partial_z^\alpha \varphi_1 \quad \text{auf} \quad F_{0,1} \quad (\alpha = 0, 1) \end{aligned} \right\}$$

und für $\varphi \in D(H_{\vec{k}})$ gilt (2.157). Im übrigen gelten zu (L1), (L1')-(L3'), (L6)-(L9), (V1)-(V3) und (A1)-(A2) analoge Aussagen, wobei die Randbedingung auf F , der energetische Raum und die hermitesche Form B wie oben angegeben zu substituieren sind.

Die Operatoren $H_{\vec{k}}$ ($\vec{k} \in BZ_1$) lassen sich als die Fasern des den unendlich ausgedehnten Kristall beschreibenden Hamiltonoperators $\mathcal{H}$ in der direkten Integraldarstellung

$$(2.223) \quad \mathcal{H} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{BZ_1}^{\oplus} H_{\vec{k}} d^3k$$

(V = Volumen von Ω)

32) Man beachte, daß die Symmetrie des so definierten Differentialoperators $-\Delta + w$ daraus resultiert, daß T unitär und $\vec{k}$ reell ist.

interpretieren und sind daher - insbesondere bezüglich ihrer spektralen Eigenschaften - eingehend in der mathematisch-physikalischen Fachliteratur studiert worden; es sei hier speziell auf die grundlegenden Arbeiten von Odeh & Keller (/79/), Avron et al. (/80/), Troianello (/81/) und Avron & Simon (/82/) sowie die zusammenfassende Betrachtung bei Reed & Simon (/61, Vol. IV, ch. XIII.16/) verwiesen. Aus der hierin enthaltenen Fülle bemerkenswerter Ergebnisse wollen wir an dieser Stelle nur folgenden Sachverhalt herausgreifen:

Für jedes $\vec{k} \in \mathbb{R}^3$ besitzt $H_{\vec{k}}$ eine kompakte Resolvente und daher ein diskretes Spektrum $\sigma_{\vec{k}}$ von Eigenwerten $\varepsilon_j(\vec{k})$ endlicher Vielfachheit, wobei gilt:

$$(2.224) \quad \varepsilon_1(\vec{k}) \leq \varepsilon_2(\vec{k}) \leq \dots \quad \text{und} \quad \varepsilon_j(\vec{k}) \rightarrow \infty \quad \text{für } j \rightarrow \infty .$$

Die Energieeigenwerte $\varepsilon_j(\vec{k})$ genügen hierbei dem Minimaxprinzip (V2)

$$(2.225) \quad \varepsilon_j(\vec{k}) = \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_0(\varphi) \mid W \subset K_t^{(1)}(\Omega) ; \dim W = j \right\} .$$

Für ein festes $\vec{k}_n \in \mathbb{BZ}_1$ hängen längs der Geraden $\vec{k} = \vec{k}_n + k_{\perp} \vec{e}_z$ ($k_{\perp} \in \mathbb{R}$) Eigenwerte und Eigenfunktionen analytisch von $k_{\perp} \in \mathbb{R}$ ab in dem folgenden Sinne (/82, thm.3.1/ und /61, Vol. IV, ch. XIII.16, Lemma 2/):

Es gibt eine Folge von reellwertigen analytischen Funktionen

$\mathbb{R} \ni k_{\perp} \mapsto \tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ und $L_2(\Omega)$ -wertigen analytischen Funktionen

$\mathbb{R} \ni k_{\perp} \mapsto \tilde{\varphi}_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ ($j \in \mathbb{N}$) derart, daß die $\tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ gerade die (ihrer Vielfachheit entsprechend oft gezählten) Eigenwerte von $H_{\vec{k}}$ sind und die $\tilde{\varphi}_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ eine Orthonormalbasis von zugehörigen Blochlösungen bilden. Die Eigenwerte $\varepsilon_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ in der (2.224) entsprechenden Anordnung stimmen stückweise auf Teilintervallen mit der jeweils geeignet umindizierten Folge $\tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ überein in der Weise, daß die $\varepsilon_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ überall stetige und stückweise analytische Funktionen von $k_{\perp}$ sind, wobei man unter Umständen bei entarteten Eigenwerten vom Graph einer (überall analytischen) Funktion $\tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_n, k_{\perp})$ auf den einer anderen überwechselt. Insbesondere ist

es ausgeschlossen, daß zwei Energiebänder über der reellen $k_{\perp}$ -Achse geschlossene Schleifen bilden oder ein "loses Ende" aufweisen³³⁾.

Falls $\vec{e}_z$ in die Richtung eines Gittervektors $\vec{R}$ des Ortsgitters G_3 weist, ist für jedes $\vec{k}_{\parallel}$ die "eindimensionale Bandstruktur" $k_{\perp} \mapsto (\tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}))_{j \in \mathbb{N}}$ periodisch und keines der Energiebänder ist konstant³⁴⁾. In jedem Fall besitzt aber die reelle Bandstruktur die Translationssymmetrie des zum Raumgitter G_3 reziproken Gitters G_3^* , weshalb es genügt, sie nur auf der "schichtadaptierten" reziproken Einheitszelle $\bar{B}Z_1 \times [-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}]$ zu betrachten, welche zur dreidimensionalen ersten Brillouinzone BZ_1 volumengleich ist, darüber hinaus aber eine der Schichtgeometrie angepaßte Symmetrie aufweist.

Interessant ist nun die Feststellung, daß die Energiewerte $\varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$ eines im unendlich ausgedehnten Kristall propagierenden Elektrons durch die zur Neumannschen Randbedingung gehörenden Eigenwerte $E_j(0)$ und die zur Dirichletschen Randbedingung gehörenden Eigenwerte $E_j(\infty)$ eingegrenzt werden, wie man mit Hilfe des Minimax-Prinzips (V2) sofort einsieht: Wegen

$$(2.226) \quad H_{t,0}^{(1)}(\Omega) \subset K_t^{(1)}(\Omega) \subset H_t^{(1)}(\Omega)$$

folgt sofort (vgl. (2.213))

$$\begin{aligned} E_j(0) &= \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_0(\varphi) \mid W \subset H_t^{(1)}(\Omega) ; \dim W = j \right\} \leq \\ &\leq \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_0(\varphi) \mid W \subset K_t^{(1)}(\Omega) ; \dim W = j \right\} = \\ (2.227) \quad &= \varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) \leq \\ &\leq \min \left\{ \max_{\varphi \in W \setminus \{0\}} R_0(\varphi) \mid W \subset H_{t,0}^{(1)}(\Omega) ; \dim W = j \right\} = \\ &= E_j(\infty) \quad , \end{aligned}$$

33) Es ist bemerkenswert, wie elegant und im Vergleich zu "klassisch-analytischen" Methoden (/83/) gleichsam mühelos sich diese Resultate mit Hilfe der Störungstheorie nach Kato & Rellich (/62, ch.VII, thm.3.9/) gewinnen lassen.

34) Man beachte, daß die Voraussetzung " $\vec{e}_z$ kollinear zu $\vec{R} \in G_3$ " nur für den Beweis von Teil c) des Lemma 2 in /61, Vol.IV, ch.XIII.16/ benötigt wird.

das heißt:

$$(2.228) \quad \{ \varepsilon_j(\vec{k}_\parallel, k_\perp) ; |k_\perp| \leq \frac{\pi}{d} \} \subset [E_j(0), E_j(\infty)]$$

(man beachte, daß $E_j(0)$ und $E_j(\infty)$ natürlich auch von $\vec{k}_\parallel$ abhängen!).

Diese Ungleichung ist die $\vec{k}_\parallel$ -aufgelöste Verallgemeinerung eines Ergebnisses von Eastham (/84, thm.6.3.1/) ; sie bietet die Möglichkeit, die Gestalt der "projizierten Bandstruktur"

$$(2.229) \quad \overline{BZ}_1 \ni \vec{k}_\parallel \longmapsto \{ \varepsilon_j(\vec{k}_\parallel, k_\perp) ; |k_\perp| \leq \frac{\pi}{d} \}$$

ohne explizite Kenntnis der dreidimensionalen Bandstruktur abzuschätzen.

3. Der Greensche Operator einer Einzelschicht als grundlegende Größe für Schichtstrukturen

In den folgenden Abschnitten finden wir die Begründung, warum das eingehende mathematische Studium des Einzelschichtproblems durchaus angezeigt war, bevor wir uns der theoretischen Behandlung der Physik von Schichtstrukturen widmen konnten; denn es wird sich zeigen, daß wir uns mit dem Greenschen Operator G_E (und der davon abzuleitenden Schichtstreuematrix) in der Tat das hierzu adäquate Instrument verschafft haben.

3.1. Die Berechnung verallgemeinerter Blochlösungen (komplexe Bandstruktur)

3.1.1 Definition und Charakterisierung verallgemeinerter Blochlösungen

Betrachtet man Strukturen, die durch eine endliche Aneinanderreihung von identischen Einzelschichten erzeugt werden ("multilayer") oder durch eine halbseitig periodische Anordnung einer Einzelschicht entstehen ("idealer Halbraum"), so lassen sich die Lösungen der Schrödingergleichung analog zum Vorgehen im Falle eines in drei Dimensionen unendlich ausgedehnten Kristalls mit Hilfe eines Ausbreitungsvektors $\vec{k}$ klassifizieren, der aber nunmehr der komplexen schichtadaptierten Brillouinzone

$$(3.1) \quad BZ_1^C := \left\{ \vec{k} = \vec{k}_\parallel + k_\perp \vec{e}_z \mid \vec{k}_\parallel \in BZ_1; \quad k_\perp \in \mathbb{C}; \quad |\operatorname{Re} k_\perp| \leq \frac{\pi}{d} \right\}$$

entstammt (/8/). Solche "verallgemeinerten Blochlösungen" $\psi_{\vec{k}}$ erfüllen nach der Reduktion auf die Elementarsäule Ω die Randbedingungen (2.18) und (2.218), wobei aber nun der Übertragungsfaktor t_0 nicht mehr auf der komplexen Einheitskreislinie zu liegen braucht.

Die Untersuchung der Abhängigkeit der Blochwellen $\psi_{\vec{k}}$ und der zugehörigen Energiewerte $\varepsilon(\vec{k})$ vom Ausbreitungsvektor $\vec{k}$ gestaltet sich besonders elegant, wenn man $\psi_{\vec{k}}$ darstellt in der Form (/85;/79;/81;/61, Vol.IV, thm.XIII.97/) ³⁵⁾

$$(3.2) \quad \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u(\vec{k}, \vec{r}) \quad .$$

Die Funktionen $u(\vec{k}, \cdot)$ sind dann die Eigenfunktionen und die Energien $\varepsilon(\vec{k})$ die zugehörigen Eigenwerte der Realisation des Operators

$$(3.3) \quad \hat{H}_{\vec{k}} := -\Delta - 2i\vec{k}\vec{\nabla} + k^2 + w$$

in $L_2(\Omega)$ mit G_3 -periodischen Randbedingungen, d.h.

$$(3.4) \quad D(\hat{H}_{\vec{k}}) = \left\{ u \in W_2^{(2)}(\Omega) \mid \begin{aligned} &\partial_n^\alpha u_0 = \partial_n^\alpha u_1 \quad \text{auf} \quad \bigcup_{l=1}^M F_{l,1} \\ &\text{und} \quad \partial_2^\alpha u_0 = T \partial_2^\alpha u_1 \quad \text{auf} \quad F_{0,1} \quad (\alpha = 0, 1) \end{aligned} \right\}.$$

Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt darin, daß der Definitionsbereich $D(\hat{H}_{\vec{k}})$ unabhängig von $\vec{k}$ ist, weshalb $(\hat{H}_{\vec{k}_n, k_\perp})_{k_\perp \in \mathbb{C}}$ eine selbstadjungierte holomorphe Familie vom Typ (A) im Sinne von Kato (/62, ch.VII, §2.1/) darstellt, was die Anwendung der analytischen Störungstheorie nach Kato & Rellich (/62, ch.VII/) gestattet ³⁵⁾. Neben den bereits in Abschnitt 2.4.2 zitierten Aussagen über die spektralen Eigenschaften von $\hat{H}_{\vec{k}}$ für reelle $k_\perp$ -Werte gewinnt man hiermit folgende Resultate bezüglich des Verhaltens für komplexe $k_\perp$:

Für jedes $k_\perp \in \mathbb{C}$ besitzt $\hat{H}_{\vec{k}}$ ein diskretes Spektrum von (i.a. komplexen) Eigenwerten $\varepsilon_j(\vec{k}_n, k_\perp)$ endlicher Vielfachheit, welche sich lokal als Zweige analytischer Funktionen von $k_\perp$ mit schlimmstenfalls algebraischen Singularitäten darstellen lassen, sodaß sich also die Bänder der "komplexen Bandstruktur" $\mathbb{C} \ni k_\perp \mapsto \varepsilon_j(\vec{k}_n, k_\perp)$ wenigstens stetig mit $k_\perp$ ändern (/62, - ch.VII, §3/). Einfache Eigenwerte hängen (lokal) analytisch von $k_\perp$ ab und man kann die zugehörigen Eigenfunktionen so wählen, daß diese es ebenfalls tun (/61, Vol.IV, thm.XII.8/); dies gilt insbesondere für das Verhalten der komplexen Bandstruktur nahe der reellen $k_\perp$ -Achse (/62, ch.VII, §3.5;/80/;

35) Eine gleichwertige Alternative bietet die $\vec{p}$ -Darstellung; vgl. z.B. /80/; /82/; /61, Vol.IV, pp.305-309/.

36) Dem in der einschlägigen Literatur oft etwas lax formulierten "kp-Verfahren" wird so ein präziser Sinn gegeben.

/82/) ³⁷⁾. Obgleich (im Unterschied zu echt eindimensionalen Systemen (/86/)) a priori das Auftreten von anderen algebraischen Singularitäten als Wurzel-Verzweigungspunkten nicht ausgeschlossen werden kann, so ist es doch "unwahrscheinlich" (/82/); hingegen ist das Vorhandensein von Wurzel-singularitäten gerade typisch, denn die einzigen komplexen Bandstrukturen, die auf der ganzen komplexen $k_{\perp}$ -Ebene holomorph sind, haben parabolische Gestalt (/82/) ³⁸⁾.

Von physikalischem Interesse sind natürlich nur solche verallgemeinerten Blochwellen, deren Energie reell ist; dies bedeutet, daß nur die Teilmenge

$$(3.5) \quad \{ (E, \vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) \mid E = \text{Re } \varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) ; \quad \text{Im } \varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) = 0 \}$$

der komplexen Bandstruktur betrachtet wird (und dies wollen wir im folgenden stets voraussetzen). Für festes $\vec{k}_{\parallel} \in \text{BZ}_1$ erhält man so über der komplexen $k_{\perp}$ -Ebene ein System "reeller Linien" (meist ebenfalls kurz als "komplexe Bandstruktur" bezeichnet), dessen Eigenschaften im einzelnen von Heine (/8/) untersucht wurden; auf eine detailliertere Darstellung sei deshalb unter Verweis auf diese Arbeit hier verzichtet.

3.1.2 Zur gruppentheoretischen Klassifikation verallgemeinerter Blochlösungen

Die Symmetrien der komplexen Bandstruktur lassen sich unterteilen in zwei Gruppen: So gibt es zum einen von der speziellen kristallographischen Struktur unabhängige Symmetrieelemente, die mit der Vertauschbarkeit des Hamiltonoperators mit dem Zeitumkehroperator

$$(3.6) \quad \mathcal{T}\psi_{\vec{k}} := \psi_{\vec{k}}^*$$

37) Jedes Band $k_{\perp} \mapsto \tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$ (vgl. Abschn. 2.4.2) ist analytisch in einer komplexen Umgebung der reellen Achse, aber diese Umgebung hängt von j ab, sodaß man i.a. keine Umgebung finden kann, in der alle Bänder analytisch sind.

38) Wie das "Einschalten" eines attraktiven Kristallpotentials die komplexe Bandstruktur freier Elektronen qualitativ ändert, wurde von Pendry & Forstmann (/9/) eindrucksvoll demonstriert.

und der Eigenschaft

$$(3.7) \quad (\hat{H}_{\vec{k}})^+ = \hat{H}_{\vec{k}}^* \quad (\vec{k} \in \text{BZ}_1^C)$$

in engem Zusammenhang stehen; sie lassen sich ausdrücken durch die Beziehungen (/85, App. C/)

$$(3.8) \quad \epsilon_j(\vec{k})^* = \epsilon_j(-\vec{k}^*)$$

(Zeitumkehrentartung (/89/)) und

$$(3.9) \quad \epsilon_j(\vec{k})^* = \epsilon_j(\vec{k}^*)$$

Zum anderen spiegelt sich in der komplexen Bandstruktur - analog zum reellen Fall (/87, §15/) - die kristallographische Struktur des in drei Dimensionen unendlich ausgedehnten Kristalls (vgl. Abschnitt 2.4.2) in der Weise wider, daß für jede Symmetrieeoperation S der Punktgruppe $\mathcal{G}$ (/49, §13/), welche die $\vec{e}_z$ -Richtung invariant läßt³⁹⁾, gilt:

$$(3.10) \quad \epsilon_j(S\vec{k}) = \epsilon_j(\vec{k})$$

Die zugehörigen verallgemeinerten Blochlösungen $\psi_{j,\vec{k}}$ werden durch ein zu $S \in \mathcal{G}$ gehörendes Raumgruppenelement auf eine Blochlösung mit komplexem Ausbreitungsvektor $S\vec{k} \bmod G_3^*$ abgebildet, was impliziert, daß die Eigenfunktionen zu einem festen Eigenwert $\epsilon_j(\vec{k})$ der komplexen Bandstruktur einen Darstellungsraum für eine irreduzible Darstellung der "kleinen Gruppe"

$$(3.11) \quad \mathcal{G}_{\vec{k}_\parallel} := \{ S \in \mathcal{G} \mid S\vec{k} = \vec{k} \bmod G_3^* \}$$

aufspannen (/49, §40/). Daß $\mathcal{G}_{\vec{k}_\parallel}$ in der Tat nur von $\vec{k}_\parallel \in \text{BZ}_1$ abhängt, resultiert daraus, daß für komplexe $k_\perp$ -Werte gilt:

$$(3.12) \quad S\vec{k} = \vec{k} \bmod G_3^* \iff S\vec{k}_\parallel = \vec{k}_\parallel \bmod G_3^* \text{ und } S\vec{e}_z = \vec{e}_z$$

39) Die Invarianz der $\vec{e}_z$ -Richtung ist notwendig, damit der Imaginärteil von $\vec{k}$ parallel zu sich selbst abgebildet wird.

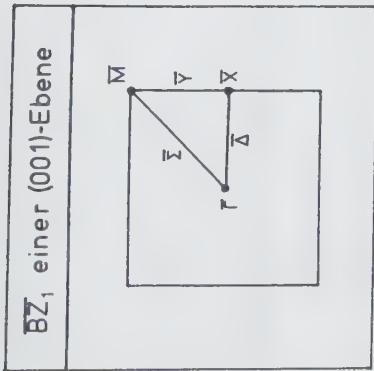
Mithin ist $\mathcal{G}_{\vec{k}_0}$ nichts anderes als die kleine Gruppe $G_{\mathcal{P}}$ eines allgemeinen reellen $\vec{k}$ -Punktes auf der Geraden $\mathcal{P} = \vec{k}_0 + \mathbb{R} \cdot \vec{e}_z$; dies bedeutet, daß sich verallgemeinerte Blochlösungen (und die zugehörigen reellen Linien der komplexen Bandstruktur) nach den aus der Theorie des unendlich ausgedehnten Kristalls bekannten irreduziblen Darstellungen von $G_{\mathcal{P}}$ (/87/;/88/;/91/) klassifizieren lassen.

Nun wird üblicherweise nur der auf die erste (Volumen-)Brillouinzone BZ_1 reduzierte Teil von $\mathcal{P}$ betrachtet, während bei der hier angewandten Betrachtungsweise auf natürliche Weise (als Schnittgebilde von $\mathcal{P}$ mit BZ_1^C) das Geradenstück $\vec{k}_0 + [-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}] \vec{e}_z$ auftritt. Um sich die Einbettung der Volumenbandstruktur in die komplexe Bandstruktur veranschaulichen zu können, ist es zweckmäßig, sich die Gestalt und Lage der planaren ersten Brillouinzone BZ_1 innerhalb der Volumen-BZ und den Verlauf der Geraden $\mathcal{P}$ zu vergegenwärtigen; für ein fcc-Raumgitter und hochsymmetrische $\vec{e}_z$ -Richtungen ist dies in Fig. 3.1.a - 3.1.c geschehen.

Aus den nämlichen Gründen wie bei der reellen Bandstruktur (/90/;/91,-ch.5,§5/) können sich im Regelfall ⁴⁰⁾ an einem allgemeinen $\vec{k}$ -Punkt zwei reelle Linien der komplexen Bandstruktur nur schneiden ⁴¹⁾, wenn sie zu inäquivalenten Darstellungen der kleinen Gruppe $\mathcal{G}_{\vec{k}}$ gehören (zufällige Entartung) oder wenn es sich um einen Sattelpunkt bzw. Verzweigungspunkt der komplexen Bandstruktur handelt, wo vier bzw. zwei Zweige des zu ein und derselben Darstellung gehörigen Systems reeller Linien glatt miteinander verheftet werden. Falls jedoch auf der Geraden $\mathcal{P} = \vec{k}_0 + \mathbb{R} \vec{e}_z$ Punkte mit höherer Punktsymmetrie als $G_{\mathcal{P}}$ vorhanden sind (siehe z.B. Tab.3.1), wird hierdurch vielfach ein Schnitt von reellen Linien an diesen hochsymmetrischen Punkten zwangsläufig impliziert (symmetriebedingte Entartung). Hierbei gelten dieselben Kompatibilitätsbeziehungen wie bei der reellen Bandstruktur (/87,§29/), wodurch in den meisten Fällen der Symmetriecharakter verallgemeinerter Blochzustände an diesen Punkten bereits eindeutig bestimmt

40) Ausnahmen vom Regelfall treten höchstens an isolierten $\vec{k}$ -Punkten oder längs sogenannter Kontaktkurven im $\vec{k}$ -Raum auf, ansonsten mit "verschwindender Wahrscheinlichkeit" im Sinne von Herring (/90/).

41) Im Regelfall schneiden sich in dieser Situation die beiden reellen Linien mit nichtverschwindendem Schnittwinkel.



Konstruktionselemente:

$$\overline{r\bar{r}} = \frac{1}{2} \overline{r} \overline{r}_z$$

Typischer Repräsentant:

$$\overline{X} = \frac{\pi}{a_0} (110)$$

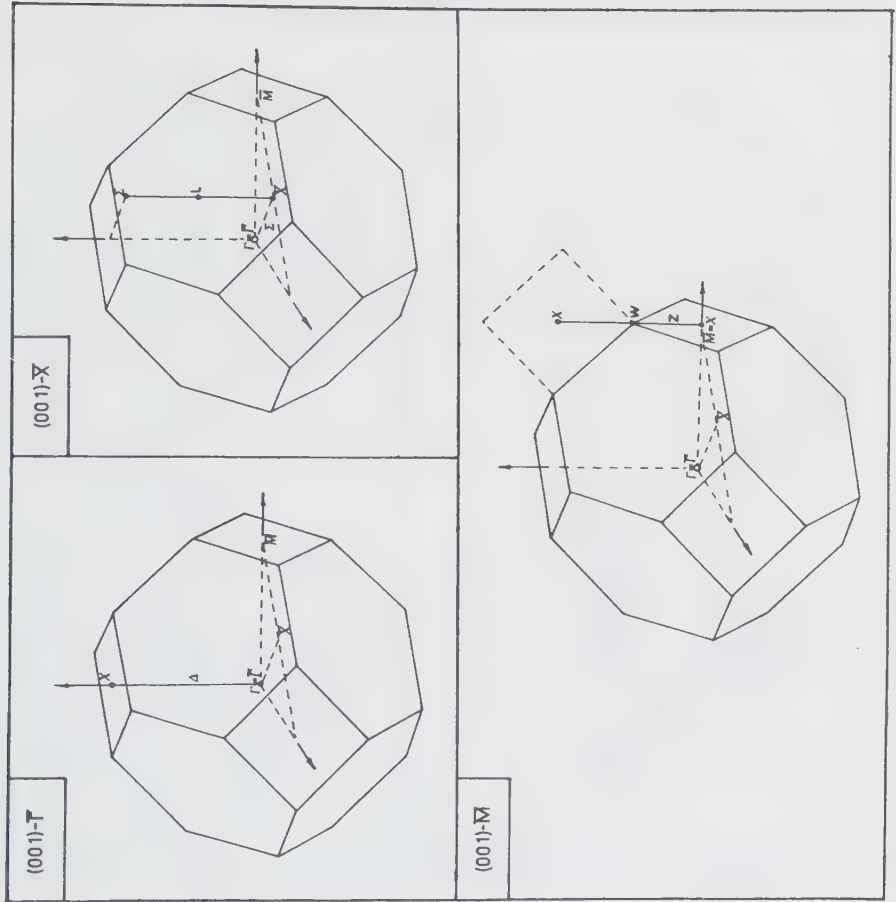
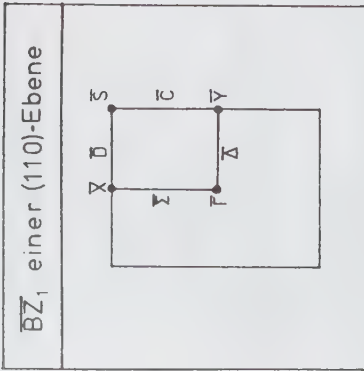


Fig. 3.1.a: Zusammenhang zwischen schichtadaptierter reziproker Einheitszelle und Volumen-BZ für eine fcc(001)-Fläche



Konstruktionselemente:

$$\overline{WX} = \frac{1}{2} \overline{UX}$$

$$\overline{WY} = \frac{1}{2} \overline{UY}$$

Typische Repräsentanten:

$$\overline{X} = \frac{\pi}{a_0} (1, 1, 0)$$

$$\overline{Y} = \frac{\pi}{a_0} (0, 0, 1)$$

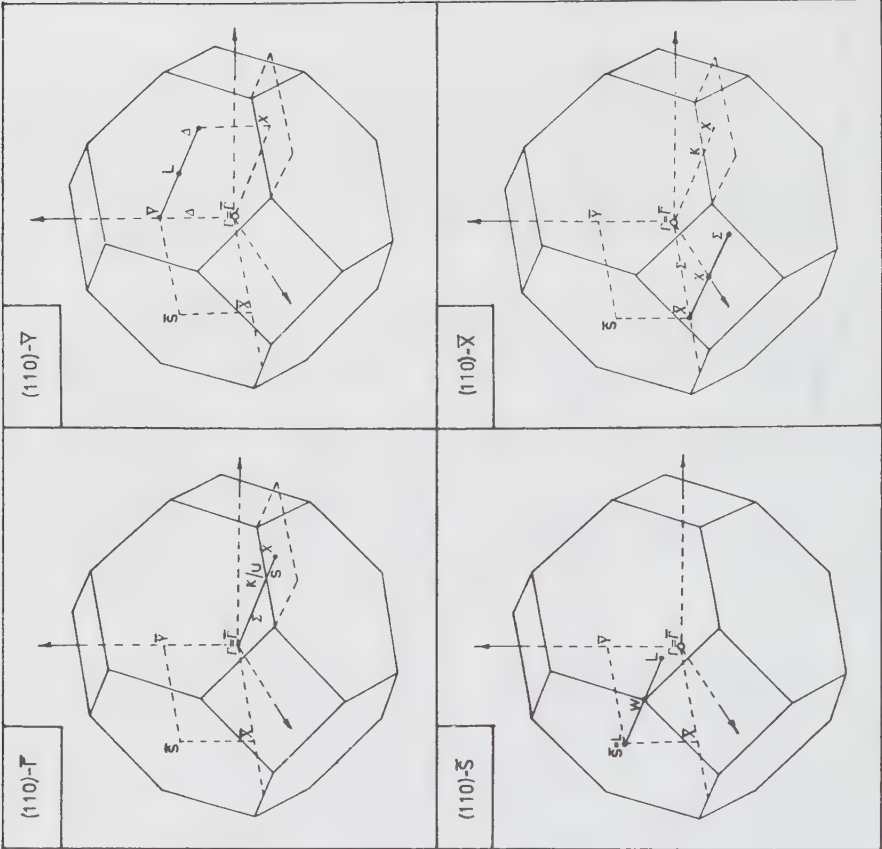
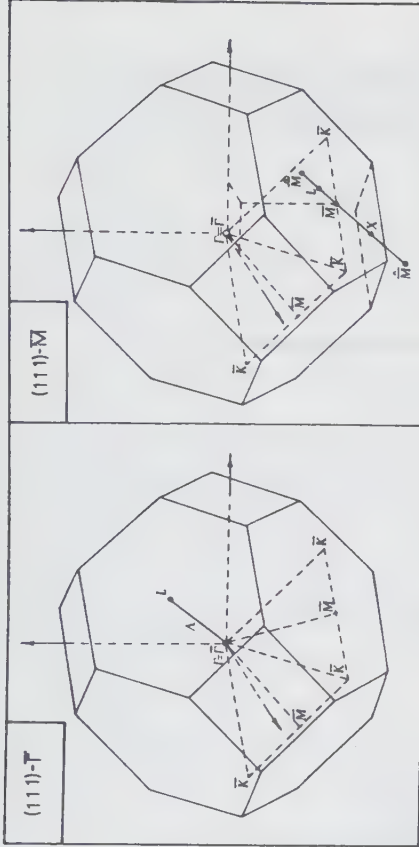
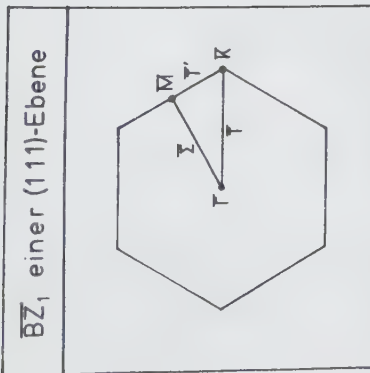


Fig. 3.1.b: Zusammenhang zwischen schichtadaptierter reziproker Einheitszelle und Volumen-BZ für eine fcc(110)-Fläche



Konstruktionselemente:

$$\begin{aligned} \vec{r}\vec{r} &= \frac{8}{9} \vec{r}\vec{r} \\ \vec{x}\vec{m} &= \frac{2}{3} \vec{x}\vec{l} \\ \vec{k}\vec{\Omega} &= \frac{1}{2} \vec{k}\vec{r} \end{aligned}$$

Typische Repräsentanten:

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \frac{4\pi}{3\sigma_0} (1, -1, 0) \\ \vec{m} &= \frac{2\pi}{3\sigma_0} (1, 1, -2) \\ \vec{\Omega} &= \frac{\pi}{3\sigma_0} (5, 3, 1) \end{aligned}$$

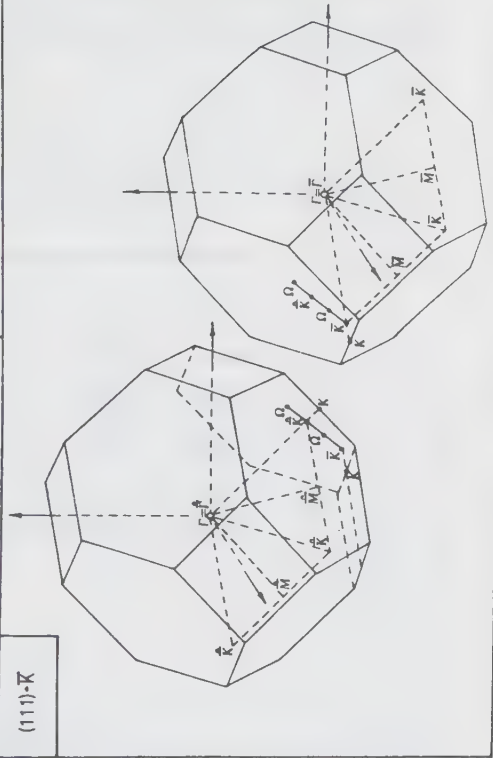


Fig. 3.1.c: Zusammenhang zwischen schichtadaptierter reziproker Einheitszelle und Volumen-BZ für eine fcc(111)-Fläche

Tab.3.1: Übersicht über das Auftreten hochsymmetrischer $\vec{k}$ -Punkte und $\vec{k}$ -Richtungen bei komplexen Bandstrukturen eines fcc-Kristalls

$\vec{k}$ -Punkt	$\gamma = \vec{k}_H + R\vec{e}_Z$
Γ	$(100)-\bar{\Gamma}, (110)-\bar{\Gamma}, (111)-\bar{\Gamma}$
X	$(100)-\bar{\Gamma}, (100)-\bar{M}, (110)-\bar{\Gamma}, (110)-\bar{X}, (111)-\bar{M}$
L	$(100)-\bar{X}, (110)-\bar{Y}, (110)-\bar{S}, (111)-\bar{\Gamma}, (111)-\bar{M}$
W	$(100)-\bar{M}, (110)-\bar{S}$
K(=U)	$(110)-\bar{\Gamma}$
$\Sigma = \frac{1}{2}\bar{\Gamma}\bar{X}_\Sigma$	$(100)-\bar{X}, (110)-\bar{\Gamma}, (110)-\bar{X}$
$\Delta = \frac{1}{2}\bar{\Gamma}\bar{X}_\Delta$	$(100)-\bar{\Gamma}, (110)-\bar{Y}$
$\Sigma = \frac{8}{9}\bar{\Gamma}\bar{K}$	$(111)-\bar{K}$

$\vec{k}$ -Richtung	$\gamma = \vec{k}_H + R\vec{e}_Z$
Δ	$(100)-\bar{\Gamma}$
Σ/S	$(110)-\bar{\Gamma}$
Z	$(100)-\bar{M}$
Q	$(110)-\bar{S}$
Λ	$(111)-\bar{\Gamma}$

ist; für den Fall eines fcc-Raumgitters sind die wesentlichen Kompatibilitätsbeziehungen in Tab.3.2 aufgelistet. Im (oftmals auftretenden) Fall, daß sich an solchen hochsymmetrischen Punkten mehrere reelle Linien mit waagrechter Tangente berühren, lassen sich die Zusammenhangsverhältnisse im Regelfall auf folgende Weise klären: Da die involvierten komplexen Energiebänder $k_{\perp} \mapsto \tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp})$ am Berührungspunkt analytisch sind (vgl. Fußnote 37) und demzufolge in einer (komplexen) Umgebung von diesem die Gestalt

$$(3.13) \quad \tilde{\varepsilon}_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) = \varepsilon_j^{(0)} + c(k_{\perp} - k_{\perp}^{(0)})^2 + O((k_{\perp} - k_{\perp}^{(0)})^3)$$

(mit reellem $\varepsilon_j^{(0)}$, $k_{\perp}^{(0)}$ und c) besitzen, gehören jeweils vier in den Berührungspunkt einmündende reelle Linien zu einer bestimmten irreduziblen Darstellung von $\mathcal{G}_{\vec{k}_{\parallel}}$; diese vier Linien verhalten sich am Berührungspunkt wie die Äste von zwei kongruenten Parabeln, die am Scheitel aneinandergeheftet und um einen rechten Winkel gegeneinander verdreht sind, wobei die eine Parabel in Richtung positiver Energie und die andere in Richtung negativer Energie geöffnet ist

(siehe Fig. 3.2).

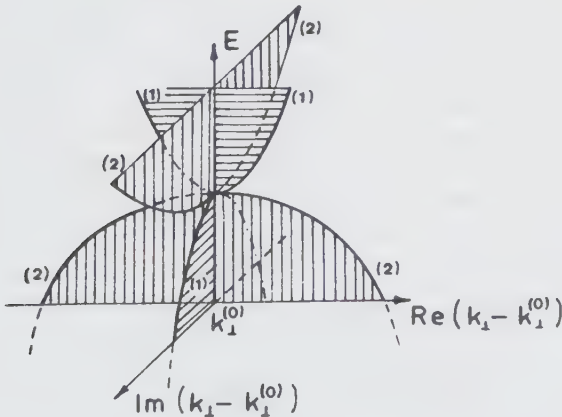


Fig. 3.2: Symmetrieklassifikation von reellen Linien an einem Sattelpunkt mit Entartung

Tab.3.2: Kompatibilitätsbeziehungen für ein fcc-Raumgitter

Γ	Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ'_{15}	Γ'_{25}	Γ'_1	Γ'_2	Γ'_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}
(100)- Γ	Δ_1	Δ_2	$\Delta_1 \Delta_2$	$\Delta'_1 \Delta_5$	$\Delta'_2 \Delta_5$	Δ'_1	Δ'_2	$\Delta'_1 \Delta'_2$	$\Delta_1 \Delta_5$	$\Delta_2 \Delta_5$
(110)- $\bar{\Gamma}$	Σ_1	Σ_4	$\Sigma_1 \Sigma_4$	$\Sigma_2 \Sigma_3 \Sigma_4$	$\Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_3$	Σ_2	Σ_3	$\Sigma_2 \Sigma_3$	$\Sigma_1 \Sigma_3 \Sigma_4$	$\Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_4$
(111)- $\bar{\Gamma}$	Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_2 \Lambda_3$	$\Lambda_1 \Lambda_3$	Λ_2	Λ_1	Λ_3	$\Lambda_1 \Lambda_3$	$\Lambda_2 \Lambda_3$

χ	χ_1	χ_2	χ_3	χ_4	χ_5	χ'_1	χ'_2	χ'_3	χ'_4	χ'_5
(100)- $\bar{\Gamma}$	Δ_1	Δ_2	Δ'_2	Δ'_1	Δ_5	Δ'_1	Δ'_2	Δ_2	Δ_1	Δ_5
(100)- $\bar{\Pi}$	Z_1	Z_1	Z_4	Z_4	$Z_2 Z_3$	Z_2	Z_2	Z_3	Z_3	$Z_1 Z_4$
(110)- $\bar{\Gamma}$	Σ_1	Σ_4	Σ_1	Σ_4	$\Sigma_2 \Sigma_3$	Σ_2	Σ_3	Σ_2	Σ_3	$\Sigma_1 \Sigma_4$
(110)- $\bar{\Sigma}$	+	+	-	-	+/-	-	-	+	+	+/-
(111)- $\bar{\Pi}$	+	-	+	-	+/-	-	+	-	+	+/-

L	L_1	L_2	L_3	L'_1	L'_2	L'_3
(100)- $\bar{\Sigma}$	+	-	+/-	-	+	+/-
(110)- $\bar{\Sigma}$	+	-	+/-	-	+	+/-
(110)- $\bar{\Sigma}$	+	-	+/-	+	-	+/-
(111)- $\bar{\Gamma}$	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_2	Λ_1	Λ_3
(111)- $\bar{\Pi}$	+	-	+/-	-	+	+/-

W	W_1	W_1'	W_2	W_2'	W_3
$(100)-\overline{M}$	Z_1	Z_2	Z_2	Z_1	$Z_3 Z_4$
$(110)-\overline{S}$	$+$	$+$	$-$	$-$	$+/-$

$K (\equiv U)$	K_1	K_2	K_3	K_4
$(110)-\overline{F}$	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4

$\Sigma = \frac{1}{2} \overline{F\overline{X}}$ ($= X_{110} = X_{100}$)	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4
$(100)-\overline{X}$	$+$	$-$	$+$	$-$
$(110)-\overline{F}$	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4
$(110)-\overline{X}$	$+$	$-$	$-$	$+$

$\Delta = \frac{1}{2} \overline{F\overline{X}}$ ($= Y_{110}$)	Δ_1	Δ_2	Δ_2'	Δ_1'	Δ_5
$(100)-\overline{F}$	Δ_1	Δ_2	Δ_2'	Δ_1'	Δ_5
$(110)-\overline{Y}$	$+$	$-$	$+$	$-$	$+/-$

$\Sigma = \frac{8}{9} \overline{F\overline{K}}$ ($= K_{111}$)	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4
$(111)-\overline{K}$	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4

Unter Beachtung der oben angegebenen Regeln läßt sich der Verlauf des zu einer bestimmten irreduziblen Darstellung gehörenden Systems reeller Linien längs der gesamten Energieachse verfolgen (/8/); hat man daher einmal für einen Energieschnitt $\varepsilon_j(\vec{k}_\parallel, k_\perp) = E$ die Symmetrie der geschnittenen reellen Linien identifiziert, so kennt man damit die Symmetrie der jeweils mit ihnen zusammenhängenden Liniensysteme und gewinnt auf diese Weise eine vollständige Symmetrieklassifikation der komplexen Bandstruktur entlang der Energieachse.

3.1.3 Die Schichtstreu matrix und das lineare Eigenwertproblem zur Bestimmung verallgemeinerter Blochlösungen.

Wir wollen nun eine Bestimmungsgleichung für verallgemeinerte Blochlösungen ableiten, bei der nicht zu gegebenem $\vec{k} \in BZ_1^C$ der Eigenwert $\varepsilon_j(\vec{k})$ und die Eigenlösung $\psi_{j,\vec{k}}$ als Unbekannte auftreten, sondern umgekehrt zu vorgegebener Energie E und planarem Ausbreitungsvektor $\vec{k}_\parallel$ der Übertragungsfaktor

$$(3.14) \quad t_\perp = e^{ik_\perp d}$$

(d.h. $k_\perp = \frac{1}{id} \ln t_\perp$) und die von der zugehörigen verallgemeinerten Blochwelle $\psi_{\vec{k}}$ auf den Randflächen F_R und F_L angenommenen Randwerte

$$(3.15) \quad b_{\vec{k}} = \mathcal{A} \psi_{\vec{k}} + \partial_n \psi_{\vec{k}}$$

als Unbekannte zu bestimmen sind; der Operator $\mathcal{A}$ ist hierbei notwendigerweise als strikt positiv vorauszusetzen (d.h. es ist in Def.(2.112) $\alpha > 0$ zu wählen). Hierzu halten wir zunächst fest, daß aufgrund der Charakterisierung (3.4) bzw. (2.222) des Lösungsraumes verallgemeinerter Blochwellen diese (für festes $\vec{k}_\parallel$) im Raum $H_t^{(2)}(\Omega)$ liegen, sodaß deren Randwerte $b_{\vec{k}}$ ebenso wie auch die Größen

$$(3.16) \quad c_{\vec{k}} := \mathcal{A} \psi_{\vec{k}} - \partial_n \psi_{\vec{k}}$$

zum Raum $H_t^{(1/2)}(F)$ gehören (vgl. (2.137)-(2.139)).

Da die ONB $\{w_{\vec{g}} | \vec{g} \in G_2^*\}$ von $L_2(Z)$ (vgl. (2.41)) eine gemeinsame Basis von Eigenvektoren sowohl von $\mathcal{A} : H_t^{(3/2)}(Z) \rightarrow H_t^{(1/2)}(Z)$ als auch von $T : L_2(Z) \rightarrow L_2(Z)$ (vgl. Def.(2.219)) darstellt, zeigt man mit Hilfe der Fouriertransformation $\mathcal{F}$ (vgl. Anhang 3) ohne Mühe, daß $\mathcal{A}$ mit T kommutiert (d.h. $D(\mathcal{A}T) = D(T\mathcal{A}) = H_t^{(3/2)}(Z)$ und $\mathcal{A}Tu = T\mathcal{A}u$ für alle $u \in H_t^{(3/2)}(Z)$); daher läßt sich die Blochbedingung (2.218) auch ausdrücken in der Form ⁴²⁾

$$(3.17) \quad \begin{aligned} c_R &= \mathcal{A} t_0 T \psi_L + t_0 T \partial_n \psi_L = t_0 T b_L \\ c_L &= \mathcal{A} (t_0 T)^{-1} \psi_R + (t_0 T)^{-1} \partial_n \psi_R = (t_0 T)^{-1} b_R \end{aligned}$$

Andererseits hängen die Randwerte $c = (c_R, c_L)$ über den Greenschen Operator $G_{E, \vec{K}_H}$ gemäß (2.163) für $E \notin \sigma$ ⁴³⁾ linear von b ab:

$$(3.18) \quad c = 2\mathcal{A}\psi_b - b = (2\mathcal{A}tr|_F G - \text{Id})b =: S_{E, \vec{K}_H} b$$

Der so definierte Operator $S_{E, \vec{K}_H} : H_t^{(1/2)}(F) \rightarrow H_t^{(1/2)}(F)$ wird in der weiteren Theorie eine wichtige Rolle spielen; wir wollen ihn als Schichtstromatrix bezeichnen. Ihre Komponentendarstellung lautet

$$(3.19) \quad \begin{pmatrix} c_R \\ c_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{K}_R - \text{Id}, & \mathcal{T}_{RL} \\ \mathcal{T}_{LR}, & \mathcal{K}_L - \text{Id} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R \\ b_L \end{pmatrix}$$

mit

$$(3.20) \quad \mathcal{K}_X := 2\mathcal{A}G_{XX} \quad ; \quad \mathcal{T}_{XY} := 2\mathcal{A}G_{XY} \quad (X, Y = R, L) \quad ,$$

wobei

$$(3.21) \quad G_{XY} : H_t^{(1/2)}(F_Y) \rightarrow H_t^{(3/2)}(F_X) \quad , \quad G_{XY} := \text{tr}|_{F_X} G|_{F_Y} \quad (X, Y = R, L)$$

42) Den Ausbreitungsvektor $\vec{K}$ bzw. $\vec{K}_H$ und die Energie E werden wir häufig als Index unterdrücken, wenn bezüglich der Art der Abhängigkeit hiervon keine Unklarheiten bestehen.

43) Wegen der monotonen Abhängigkeit des Spektrums $\sigma = \sigma_\alpha$ vom Parameter α (vgl. Abschnitt 2.4.1) läßt sich die Bedingung $E \notin \sigma_\alpha$ für ein geeignetes α stets erfüllen.

(man beachte, daß - wie in Abschnitt 2.3.2 eingehend diskutiert - der Greensche Operator G den Raum $H_t^{(1/2)}(F)$ in den Raum $H_t^{(2)}(\Omega)$ und $\text{tr}|_F$ diesen wiederum auf $H_t^{(3/2)}(F)$ abbildet).

Durch Gleichsetzen von (3.17) mit (3.19) erhalten wir nun die gewünschte Eigenwertgleichung

$$(3.22) \quad \begin{pmatrix} \mathcal{R}_R - \text{Id} & \mathcal{T}_{RL} \\ \text{Id} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R \\ b_L \end{pmatrix} = t_\perp t_\parallel T \oplus T \begin{pmatrix} 0 & \text{Id} \\ \mathcal{T}_{LR} & \mathcal{R}_L - \text{Id} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R \\ b_L \end{pmatrix}$$

(mit $t_\perp := \exp(ik_\perp d)$; $t_\parallel := \exp(i\vec{k}_\parallel \vec{a}_{3\parallel})$; $t_0 = t_\perp t_\parallel$ gemäß (2.220)), welcher die Randwerte $b_{\vec{k}}$ einer verallgemeinerten Blochwelle $\psi_{\vec{k}}$ genügen müssen. Hat man umgekehrt zu vorgegebenem $(E, \vec{k}_\parallel)$ eine Eigenlösung $b_{E, \vec{k}_\parallel, k_\perp} \in H_t^{(1/2)}(F)$ mit Eigenwert $t_\perp = \exp(ik_\perp d)$ bestimmt, so rechnet man sofort nach, daß $\psi_{E, \vec{k}} = G_{E, \vec{k}_\parallel} b_{E, \vec{k}}$ eine Blochlösung zum Ausbreitungsvektor $\vec{k} = \vec{k}_\parallel + k_\perp \vec{e}_z$ darstellt.

Für die abstrakte Theorie haben wir durch diese Korrespondenz zwar nichts Entscheidendes gewonnen, denn Gl.(3.22) ist eine allgemeine Eigenwertaufgabe der Form " $Pb = tQb$ ", die sich nicht mit Standardmethoden (z.B. /59, Kap.3/ oder /62, ch.VII. §6/) behandeln läßt; dies ist schon deswegen plausibel, weil die Tatsache, daß sich die reellen Linien der komplexen Bandstruktur im allgemeinen beliebig tief in die komplexe $k_\perp$ -Ebene hinein erstrecken, für die Eigenwerte $t_\perp$ die Konsequenz hat, daß diese sowohl bei 0 als auch im Unendlichen einen Häufungspunkt besitzen. Daher darf man von P und Q keine der üblicherweise vorausgesetzten Regularitätseigenschaften erwarten; allerdings wollen wir für P und Q wenigstens Stetigkeit voraussetzen können. Dies läßt sich entweder dadurch erreichen, daß wir die Blochwellen $\psi_{\vec{k}}$ als schwache Lösungen der Schrödingergleichung interpretieren (Abschnitt 2.3.1) und dementsprechend Gl.(3.22) als Eigenwertgleichung in $H_t^{(-1/2)}(F)$ lesen (man beachte, daß wegen (L3), (B2) und Beh.3.11 in Anhang 3 $H_t^{(-1/2)}(F) \xrightarrow{G} H_t^{(1)}(\Omega) \xrightarrow{\text{tr}} H_t^{(1/2)}(F) \xrightarrow{\Lambda} H_t^{(-1/2)}(F)$ eine Sequenz stetiger linearer Abbildungen ist, sodaß man $\mathcal{R}_X$ und $\mathcal{T}_{XY}$ als

stetige Endomorphismen von $H_t^{(-1/2)}(F)$ auffassen kann) ⁴⁴⁾ oder aber auch dadurch, daß wir durch Multiplikation mit $(2\mathcal{A})^{-1}$ das Eigenwertproblem auf die Form

$$(3.23) \quad \begin{pmatrix} G_{RR} - (2\mathcal{A})^{-1}, & G_{RL} \\ (2\mathcal{A})^{-1}, & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R \\ b_L \end{pmatrix} = t_{\perp} t_{\parallel} T \oplus T \begin{pmatrix} 0, & (2\mathcal{A})^{-1} \\ G_{LR}, & G_{LL} - (2\mathcal{A})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R \\ b_L \end{pmatrix}$$

bringen, aufzufassen als Eigenwertgleichung in $H_t^{(1/2)}(F)$

(man beachte hierbei, daß wegen (2.163) und (B2)

$G_{XY} : H_t^{(1/2)}(F) \xrightarrow{G} H_t^{(1)}(\Omega) \xrightarrow{\text{tr}} H_t^{(1/2)}(F)$ stetig ist und

$\mathcal{A}^{-1} : H_t^{(1/2)}(F) \rightarrow H_t^{(1/2)}(F)$ vollstetig ist); diese Betrachtungsweise entspricht dem Begriff starker Lösungen (Abschnitt 2.3.2). In keinem der beiden Fälle wird jedoch P oder Q eine stetige Inverse in $H_t^{(-1/2)}(F)$ bzw. $H_t^{(1/2)}(F)$ besitzen, denn ist $(t_{\perp}^{(\nu)})_{\nu \in \mathbb{N}}$ eine Folge von Eigenwerten mit $t_{\perp}^{(\nu)} \rightarrow 0$ (bzw. $t_{\perp}^{(\nu)} \rightarrow \infty$) für $\nu \rightarrow \infty$ und bezeichnet $b^{(\nu)}$ eine normierte Folge zugehöriger Eigenvektoren, so ist $\lim_{\nu \rightarrow \infty} P b^{(\nu)} = 0$ (bzw. $\lim_{\nu \rightarrow \infty} Q b^{(\nu)} = 0$),

was die Beschränktheit der Inversen P^{-1} bzw. Q^{-1} (sofern diese überhaupt existieren) ausschließt. Man würde daher einen recht mühevollen Weg einschlagen, wollte man die Resultate der vorhergehenden Abschnitte durch ein Studium der Lösungsmannigfaltigkeit der Eigenwertaufgabe (3.22) bzw. (3.23) gewinnen.

Nichtsdestoweniger erweist es sich als sehr zweckmäßig, zur konkreten, numerischen Bestimmung verallgemeinerter Blochwellen und der reellen Linien der komplexen Bandstruktur von Gl.(3.22) bzw. (3.23) auszugehen, denn zur Behandlung des durch endlichdimensionale Approximation der jeweils involvierten Operatoren P und Q (vgl. Abschnitt 2.3.4) entstehenden allgemeinen Matrixeigenwertproblems stehen effiziente Algorithmen zur Verfügung (/92;/93;/94;/95/), mit deren Hilfe uns eine im Vergleich zu anderen Verfahren recht direkte Berechnungsmethode erschlossen wird. Statt eine aufwendige Suche nach den Nullstellen einer Koeffizientendeterminante zu betreiben (wie z.B. im von Holzwarth & Lee vorgeschlagenen Verfahren (/37/)) oder auf ausgeklügelte Weise den ins Komplexe eingebetteten

44) Die Schichtstreu matrix S_{E, K_0} nach Def.(3.18) ist demzufolge besser als (stetiger) Operator $H_t^{(-1/2)}(F) \rightarrow H_t^{(-1/2)}(F)$ aufzufassen.

reellen Linien nachzuspüren (/5/), gestattet das hier formulierte Eigenwertproblem, diese direkt in der Form

$$(3.24) \quad \mathbb{R} \ni E \mapsto k_{\perp}^{(j)}(E, \vec{k}_{\parallel}) = \frac{1}{i d} \ln t_{\perp}^{(j)}(E, \vec{k}_{\parallel}) \in \mathbb{C}$$

zu bestimmen, wobei bemerkenswert ist, daß es sich um eine in $t_{\perp}$ lineare Eigenwertaufgabe handelt. Da überdies nur die "Übertragungseigenschaften" des Greenschen Operators G (d.h. die Operatoren G_{XY} ($X, Y = R, L$)) und die Randwerte (b_R, b_L) der Blochwellen auftreten, läßt sich die Berechnung redundanter Größen wie der expliziten Ortsabhängigkeit der Blochlösungen $\psi_{\vec{k}}$ in der Elementarzelle Ω umgehen, ohne daß man freilich deswegen darauf verzichten müßte, sich diese nach Lösung des Eigenwertproblems je nach Bedarf zu verschaffen (die Wellenfunktionen z.B. vermöge $\psi_{\vec{k}} = G_{E, \vec{k}_{\parallel}} b_{\vec{k}}$).

Besonders hinzuweisen ist schließlich auf die Tatsache, daß bei der hier entwickelten Methode die dreidimensionale Translationssymmetrie des unendlich ausgedehnten Kristalls nur in Form des Translationsoperators $T(\vec{a}_{3\parallel})$ und des Zahlenfaktors $t_{\parallel} = \exp(i\vec{k}_{\parallel} \vec{a}_{3\parallel})$ in die Eigenwertaufgabe eingeht, während die Operatoren G_{XY} ($X, Y = R, L$) und Λ nur von den planaren Symmetrieeigenschaften einer Einzelschicht abhängen. Bei den herkömmlichen Verfahren zur Berechnung der reellen Bandstruktur (/96;/97/) ist eine derartige Separation der Symmetrieabhängigkeit nicht möglich mit der Folge, daß als elementare Struktureinheit immer eine Einheitszelle des Raumgitters G_3 gewählt werden muß. Bei kompliziert strukturierten Schichtkristallen (/3/) mit einer entsprechend großen Zahl von Basisatomen gerät daher der numerische Aufwand mit zunehmender Komplexität der Struktur sehr bald an die Grenze der zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten, wodurch man gezwungen ist, entweder die Anforderung an die Rechengenauigkeit zu reduzieren oder sich bei der Bestimmung der Energiebänder auf hochsymmetrische $\vec{k}$ -Punkte zu beschränken (d.h. durch Ausreduktion des Hamiltonoperators nach den irreduziblen Darstellungen der kleinen Gruppe von $\vec{k}$ das Eigenwertproblem in niederdimensionale Teilprobleme zu zerfällen) oder die tatsächlich vorliegende Kristallstruktur durch eine Modellstruktur mit höherer Symmetrie (d.h. mit einer kleineren Elementarzelle mit weniger Basisatomen) zu ersetzen; es ist recht illustrativ, sich diese Problematik am Beispiel von Bandstrukturrechnungen an Metallocen zu vergegenwärtigen (/98;/99;/100;/101/).

In solch einer Situation eröffnet sich mit der hier dargestellten Methode folgender Ausweg: Man unterteilt die Einheitszelle des Raumgitters $Z \times (0,d)$ in geeignet gewählte "Scheiben" der Form $Z \times (z_i, z_{i+1})$ ($0 = z_1 < z_2 < \dots < z_N = d$) derart, daß in jeder Scheibe eine numerisch praktikable Zahl von Basisatomen enthalten ist, wobei natürlich die dreidimensionale Translationssymmetrie des Schichtkristalles verloren geht und nur noch von der planaren Translationssymmetrie parallel zu den Schichten Gebrauch gemacht wird. Nun werden zunächst für jede Scheibe die Schichtstreu­matrizen (3.19) bestimmt und dann mit Hilfe der Schichtverknüpfungs­gleichungen (Abschnitt 3.2) die Operatoren G_{XY} ($X, Y = R, L$) für die ganze Einheitszelle $Z \times (0,d)$ berechnet. Erst beim Aufstellen der Eigenwert­gleichung (3.22) bzw. (3.23) wird durch die Größen $T(\vec{a}_{3\parallel})$ und $t_{\parallel}$ die Drei­dimensionalität der Kristallsymmetrie berücksichtigt. Der Gesamtrechenauf­wand ist bei einem solchen Vorgehen zwar sicherlich nicht kleiner als bei den oben zitierten Verfahren, aber er verteilt sich auf numerisch gut handhabbare Teilaufgaben.

3.1.4 Adjungiertheits- und Orthogonalitätseigenschaften (Stromerhaltung)

Aus der Hermitezität des Einzelschichtproblems (2.118) lassen sich einige wichtige Eigenschaften der Operatoren G_{XY} (vgl. Def.(3.21)) und der Lö­sun­gen der Eigenwertaufgabe (3.22) bzw. (3.23) folgern.

Betrachten wir zunächst zwei Randvorgaben $b, \hat{b} \in H_t^{(-1/2)}(F)$ und deren zu­gehörige Lösungen $\psi_b, \psi_{\hat{b}}$ des Einzelschichtproblems: Nach Gl.(2.118) erhalten wir für $E \in \mathbb{R} \setminus \sigma$ die Beziehung

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{b} | \psi_b \rangle_F &= B(\psi_{\hat{b}}, \psi_b) - E \langle \psi_{\hat{b}} | \psi_b \rangle_{\Omega} = \\
 (3.25) \quad &= (B(\psi_b, \psi_{\hat{b}}) - E \langle \psi_b | \psi_{\hat{b}} \rangle_{\Omega})^* = \\
 &= \langle b | \psi_{\hat{b}} \rangle_F^* \quad ;
 \end{aligned}$$

wegen $\psi_b = Gb$ und $\psi_{\hat{b}} = G\hat{b}$ gilt somit:

$$(3.26) \quad \langle \hat{b} | Gb \rangle_F = \langle b | G\hat{b} \rangle_F^* \quad \text{für alle } b, \hat{b} \in H_t^{(-1/2)}(F)$$

Für die Komponenten G_{XY} bedeutet dies

$$(3.27) \quad G_{XY}^+ = G_{YX} \quad (X, Y = R, L) ;$$

hierbei läßt sich G_{XY}^+ entweder als (Banachraum-)Adjungierte (/61, Vol. I, §VI.2/) der stetigen linearen Abbildung $G_{XY} : H_t^{(-1/2)}(F_Y) \longrightarrow H_t^{(1/2)}(F_X)$ auffassen (man beachte, daß sowohl Definitionsbereich wie Bildraum von $G_{XY}^+ : H_t^{(1/2)}(F_X)' \longrightarrow H_t^{(-1/2)}(F_Y)'$ wegen $H_t^{(s)}(Z)' = H_t^{(-s)}(Z)$ gerade mit dem von G_{YX} übereinstimmen), man kann G_{XY} aber auch als (Hilbertraum-)Adjungierte des beschränkten linearen Operators $G_{XY} : L_2(F_Y) \longrightarrow L_2(F_X)$ lesen.

Gl.(3.26) gestattet folgende physikalische Interpretation:

Sind $\psi = Gb$ und $\hat{\psi} = G\hat{b}$ mit $b, \hat{b} \in H_t^{(1/2)}(F)$ zwei (starke) Lösungen des Einzelschichtproblems, so genügen ihre Randwerte auf F ja der Beziehung (2.160); durch Einsetzen in Gl.(3.26) folgt daher

$$(3.28) \quad \langle \mathcal{L}\hat{\psi} + \partial_n \hat{\psi} | \psi \rangle_F = \langle \hat{\psi} | \mathcal{L}\psi + \partial_n \psi \rangle_F$$

und wegen der Selbstadjungiertheit von $\mathcal{L}$ schließlich

$$(3.29) \quad \int_F (\hat{\psi}^* \partial_n \psi - \partial_n \hat{\psi}^* \psi) d^2 r_{||} = 0$$

Insbesondere genügt eine Lösung des Einzelschichtproblems der (integralen) Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$(3.30) \quad \vec{j} = -i(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \vec{\nabla} \psi^* \psi)$$

in der Form

$$(3.31) \quad \int_{\partial\Omega} \vec{j} \cdot d\vec{S} = -i \int_F (\psi^* \partial_n \psi - \partial_n \psi^* \psi) d^2 r_{||} = 0$$

Sind $\psi^{(\nu)} = \psi_{\vec{k}_{||}, k_{\perp}^{(\nu)}}$ und $\psi^{(\mu)} = \psi_{\vec{k}_{||}, k_{\perp}^{(\mu)}}$ zwei verallgemeinerte Blochwellen (d.h. ihre Randwerte $b^{(\nu)}$ und $b^{(\mu)} \in H_t^{(1/2)}(F)$ sind Lösungen der Eigenwertaufgabe (3.22) bzw. (3.23) mit zugehörigen Eigenwerten $t_{\perp}^{(\nu)}$ und $t_{\perp}^{(\mu)}$), so

kann man aus (3.29) mit Hilfe der Blochbedingung (2.218) weiter schließen:

$$(3.32) \quad \int_{F_L} (\psi_L^{(\mu)*} \partial_n \psi_L^{(\nu)} - \partial_n \psi_L^{(\mu)*} \psi_L^{(\nu)}) d^2 r_n (1 - t_\perp^{(\mu)*} t_\perp^{(\nu)}) = 0$$

Wir erhalten somit die "Orthogonalitätsrelation" (vgl. /102, equ.2.31/)

$$(3.33) \quad \int_{F_L} (\psi_L^{(\mu)*} \partial_n \psi_L^{(\nu)} - \partial_n \psi_L^{(\mu)*} \psi_L^{(\nu)}) d^2 r_n = 0 \quad \text{falls } t_\perp^{(\mu)*} \neq t_\perp^{(\nu)-1}$$

(d.h. falls $k_\perp^{(\mu)*} \neq k_\perp^{(\nu)} \bmod \frac{2\pi}{a} \mathbb{Z}$; vgl. (3.9)).

Insbesondere besitzt eine Blochwelle mit nichtverschwindendem Imaginärteil von $k_\perp$ keinen Wahrscheinlichkeitsstrom in der z-Richtung:

$$(3.34) \quad \int_{F_L} \vec{j} \cdot d\vec{s} = \int_{F_R} \vec{j} \cdot d\vec{s} = 0 \quad , \quad \text{falls } |t_\perp| \neq 1$$

Die Orthogonalitätsrelation (3.33) läßt sich auch in einer Form ausdrücken, bei der keine Normalenableitungen, sondern nur die Randwerte $b^{(\nu)}$ und $b^{(\mu)}$ auftreten. Wir definieren hierzu auf $H_t^{(-1/2)}(F) \times H_t^{(-1/2)}(F)$ die (beschränkte) hermitesche Sesquilinearform

$$(3.35) \quad I(\hat{b}, b) := \frac{1}{i} (\langle \hat{b}_R | G_{RL} b_L \rangle_{F_R} - \langle \hat{b}_L | G_{LR} b_R \rangle_{F_L}) \quad ;$$

aufgrund der Adjungiertheitsbeziehung (3.27) besitzt diese für $b, \hat{b} \in H_t^{(-1/2)}(F)$ auch die Darstellung

$$(3.36) \quad I(\hat{b}, b) = \frac{1}{i} (\langle b_L | \hat{\psi}_L \rangle_{F_L}^* - \langle \hat{b}_L | \psi_L \rangle_{F_L})$$

wobei $\psi = Gb$ und $\hat{\psi} = G\hat{b}$ die zugehörigen (schwachen) Lösungen des Einzelschichtproblems bezeichnen. Der Wert $I(b, b)$ auf der Diagonale läßt sich als (verallgemeinerter) Wahrscheinlichkeitsstrom interpretieren, den der elektronische Zustand $\psi = Gb$ durch die Randfläche F_L (bzw. wegen (3.26) oder (3.29) auch durch die Randfläche F_R) trägt. Dies wird ersichtlich, wenn man speziell Randwerte $b, \hat{b} \in H_t^{(1/2)}(F)$ betrachtet; in diesem Fall gilt dann " $\Delta \psi + \partial_n \psi = b$ auf F " und I nimmt folgende Form an:

$$(3.37) \quad I(\hat{b}, b) = -i \int_{F_L} (\hat{\psi}_L^* \partial_n \psi_L - \partial_n \hat{\psi}_L^* \psi_L) d^2 r_n$$

Setzt man hier nun zwei Blochwellen $\psi^{(\nu)}$, $\psi^{(\mu)}$ (wie oben angegeben) ein, so nimmt die Orthogonalitätsrelation (3.33) die Gestalt

$$(3.38) \quad I(b^{(\mu)}, b^{(\nu)}) = \begin{cases} =: I_{\mu\nu} & , \text{ falls } k_{\perp}^{(\mu)*} = k_{\perp}^{(\nu)} \bmod \frac{2\pi}{d} \mathbb{Z} \\ = 0 & , \text{ falls } k_{\perp}^{(\mu)*} \neq k_{\perp}^{(\nu)} \bmod \frac{2\pi}{d} \mathbb{Z} \end{cases}$$

an, wobei also das Diagonalelement $I_{\mu\nu}$ den WS-Strom der Blochwelle $\psi^{(\nu)}$ zum reellen Ausbreitungsvektor $(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}^{(\nu)})$ durch einen Querschnitt Z der Elementarsäule Ω darstellt.

In diesem Zusammenhang wollen wir auf einige nützliche Relationen für $I_{\mu\nu}$ und das Normierungsintegral

$$(3.39) \quad N(E, \vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}^{(\nu)}(\vec{k}_{\parallel}, E)) := N_{\nu} := \|\psi^{(\nu)}\|_{L_2(\Omega)}^2$$

hinweisen. Differenziert man die von Gl.(2.118) herrührende Beziehung

$$(3.40) \quad B(\psi^{(\nu)}, \psi^{(\nu)}) - E \cdot \|\psi^{(\nu)}\|_{L_2(\Omega)}^2 = \langle b^{(\mu)} | G b^{(\mu)} \rangle_F$$

nach der Energie E (man beachte: $\psi^{(\nu)} = \psi_{E, \vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}^{(\nu)}}$ mit $k_{\perp}^{(\nu)} = k_{\perp}^{(\nu)}(\vec{k}_{\parallel}, E)!$), läßt sich mit Hilfe von Gl.(3.26) einerseits sofort herleiten:

$$(3.41) \quad N_{\nu} = \langle b^{(\nu)} | \partial_E G | b^{(\nu)} \rangle_F$$

Durch Differentiation der aus der Eigenwertgleichung (3.22) gefolgerten Beziehung

$$(3.42) \quad 2\alpha \langle b^{(\nu)} | G b^{(\nu)} \rangle_F - (b^{(\nu)} | b^{(\nu)})_{-1/2, F} = (b^{(\nu)} | \begin{pmatrix} 0 & t_0^{(\nu)T} \\ (t_0^{(\nu)T})^+ & 0 \end{pmatrix} b^{(\nu)})_{-1/2, F}$$

nach E erhält man andererseits zunächst

$$(3.43) \quad \alpha \langle b^{(\nu)} | \partial_E G | b^{(\nu)} \rangle_F = \frac{d}{2i} \frac{\partial k_{\perp}^{(\nu)}}{\partial E} ((-b_R^{(\nu)}, b_L^{(\nu)}) | S b^{(\nu)})_{-1/2, F}$$

und wegen

$$(3.44) \quad \frac{1}{2} \text{Im}((-b_R^{(\nu)}, b_L^{(\nu)}) | S b^{(\nu)})_{-1/2, F} = 2\alpha \text{Im} \langle b_L^{(\nu)} | G_{LR} b_R^{(\nu)} \rangle_{F, L}$$

schließlich

$$(3.45) \quad I_{\nu\nu} = - N_{\nu} \left(d \cdot \frac{\partial k^{(\nu)}}{\partial E} \right)^{-1}$$

(vgl. /102, equ.2.31/).

Beachtung verdient der Umstand, daß bei der Herleitung der Beziehungen (3.26), (3.38), (3.41), (3.43) und (3.45) stets nur eine variationelle (Galerkinsche) Formulierung sowohl der Schrödingergleichung (in Gl.(2.118)) als auch der Eigenwertaufgabe (3.22) in der Form

$$(3.46) \quad 2\alpha \langle u | G b \rangle_F = (u | b)_{-1/2, F} = (u | (t_0 T b_L, (t_0 T)^{-1} b_R))_{-1/2, F}$$

für alle $u \in H_t^{(-1/2)}(F)$

als Grundlage genügt, sodaß die genannten Beziehungen auch dann exakt erfüllt sind, wenn die jeweils involvierten Größen im Sinne der in Abschnitt 2.3.4 diskutierten "internen Approximation" durch ihre Näherungen ersetzt werden.

Zuletzt wollen wir noch auf den Fall eingehen, daß die Einzelschicht spiegelsymmetrisch zu ihrer Mittelebene $z = (z_R + z_L)/2$ ist. Einer Vertauschung der "rechten" und "linken" Komponente des Randwertes b muß dann eine Vertauschung der Werte ψ_R und ψ_L entsprechen, was bedeutet, daß die Matrix $(G_{XY})_{X,Y=R,L}$ mit der Spiegeloperation $(u_R, u_L) \mapsto (u_L, u_R)$ vertauscht; dies ist gleichbedeutend zu

$$(3.47) \quad G_{RR} = G_{LL} \quad ; \quad G_{RL} = G_{LR} \quad .$$

Genügen darüberhinaus $t_{||}$ und T der Bedingung

$$(3.48) \quad (t_{||} T)^2 = \text{Id}$$

(dies ist äquivalent mit $2\vec{a}_{3||} \in G_2$), so ist die Eigenwertaufgabe (3.22) invariant unter der Operation

$$(3.49) \quad (b_R, b_L, t_{\perp}) \mapsto (b_L, b_R, t_{\perp}^{-1}) \quad ,$$

was impliziert, daß $(b_R^{(\nu)}, b_L^{(\nu)})$ eine Eigenlösung zum Eigenwert $t_{\perp}^{(\nu)}$ genau dann ist, wenn $(b_L^{(\nu)}, b_R^{(\nu)})$ eine Eigenlösung zum Eigenwert $t_{\perp}^{(\nu)-1}$ ist (d.h. $(E, \vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}^{(\nu)})$ ist energetisch entartet mit $(E, \vec{k}_{\parallel}, -k_{\perp}^{(\nu)})$, vgl. (3.10)). Während wir im allgemeinen nur wissen, daß wegen der Eigenschaft (3.9) der komplexen Bandstruktur in der Menge der $t_{\perp}$ -Eigenwerte mit $t_{\perp}$ auch $(t_{\perp}^*)^{-1}$ enthalten ist, können wir dies im vorliegenden Fall auch für $t_{\perp}^{-1}$ und $t_{\perp}^*$ konstatieren.

Diese Symmetrie gestattet es, die Eigenwertgleichung (3.22) auf eine einfachere Gestalt zu bringen⁴⁵⁾, indem man diese zunächst schreibt als

$$(3.50) \quad Ub_R + Vb_L = t_{\perp} b_L \quad ; \quad Ub_L + Vb_R = t_{\perp}^{-1} b_R$$

mit

$$(3.51) \quad U := t_{\parallel} T(\mathcal{R} - \text{Id}); \quad V := t_{\parallel} T \mathcal{T} \quad ; \quad \mathcal{R} := \mathcal{R}_R = \mathcal{R}_L \quad ; \quad \mathcal{T} := \mathcal{T}_{RL} = \mathcal{T}_{LR}$$

und die vier durch Multiplikation mit U und V entstehenden Gleichungen in geeigneter Weise addiert und subtrahiert. Man erhält so schließlich das in $\cos(k_{\perp} d)$ lineare Eigenwertproblem

$$(3.52) \quad (\text{Id} + (V-U)(V+U))b_{+} = 2\cos(k_{\perp} d)Vb_{+} \quad ,$$

wobei $b_{+} := b_R + b_L$ bezeichnet. Für numerische Zwecke ist die diskretisierte Form dieser Gleichung der des ursprünglichen Problems (3.22) unbedingt vorzuziehen, da man doch bei gleicher Genauigkeit eine Eigenwertaufgabe mit einer um die Hälfte verringerten Dimension zu lösen hat. Falls man außer dem Eigenwert $k_{\perp}$ auch die Eigenvektoren (b_R, b_L) benötigt, lassen sich diese aus b_{+} und $k_{\perp}$ vermöge Gl.(3.50) berechnen.

45) Der hier angewandte "Trick" wurde wohl erstmals von Pendry (/103/) benutzt.

3.1.5 Einige Eigenschaften konsistenter Approximationen

Nachdem wir uns über die Äquivalenz der Eigenwertaufgabe (3.22) bzw. (3.23) für $k_{\perp} = k_{\perp}(E, \vec{k}_{\parallel})$ zum in Abschnitt 3.1.1 bzw. 2.4.2 dargestellten Eigenwertproblem für $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$ vergewissert haben, ist nun noch zu untersuchen, ob dies auch bei approximativen Lösungen im Sinne von Abschnitt 2.3.4 gewährleistet ist. Sicherlich wird dies nur dann der Fall sein, wenn die Diskretisierung von Gl.(3.22) bzw. (3.23) konsistent mit Gl.(2.179) bzw. (2.180) erfolgt; hierbei grundlegend ist die Aussage (A3) (siehe S.59), nach der es zu einer Folge intern approximierender Räume $V_N \subset H_t^{(1)}(\Omega)$ gemäß (B7) eine Folge approximierender Greenscher Operatoren $G_E^{(N)} : H_t^{(-1/2)}(F) \rightarrow V_N$ gibt, welche (im Sinne starker Operatorkonvergenz bzgl. der $H_t^{(1)}(\Omega)$ -Norm) gegen den "exakten" Operator G_E strebt. Die Definitionsgleichung für $G_E^{(N)}$ lautet nach (2.179):

$$(3.53) \quad B_{\alpha}(G_E^{(N)}b, \chi) - E \langle G_E^{(N)}b | \chi \rangle_{\Omega} = \langle b | \chi \rangle_F$$

für alle $\chi \in V_N$, $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$

Definiert man $\text{tr}V_N := \text{tr}|_F(V_N) \subset H_t^{(1/2)}(F)$ als den Raum der Randwerte der Funktionen aus V_N , so erhält man durch Einschränkung von $G_E^{(N)}$ auf $\text{tr}V_N$ und nachgeschalteter Spurbildung Approximanten für G_{XY} gemäß

$$(3.54) \quad \text{tr}V_N \ni b \mapsto \text{tr}|_F(G_E^{(N)}b) = \begin{pmatrix} G_{RR}^{(N)} & G_{RL}^{(N)} \\ G_{LR}^{(N)} & G_{LL}^{(N)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R \\ b_L \end{pmatrix} \in \text{tr}V_N$$

Ein möglicher Weg, die Eigenwertaufgabe (3.23) zu diskretisieren, besteht dann darin, diejenigen $\tilde{b} \in \text{tr}V_N$ und $\tilde{t}_0 = \tilde{t}_{\perp} t_{\parallel} \in \mathbb{C}$ zu suchen, für welche gilt:

$$(3.55) \quad 2\alpha(u|G_E^{(N)}\tilde{b})_{1/2,F} - \langle u | \tilde{b} \rangle_F = \langle u | (\tilde{t}_0 T \tilde{b}_L, (\tilde{t}_0 T)^{-1} \tilde{b}_R) \rangle_F$$

für alle $u \in \text{tr}V_N$

Diese Gleichung entspricht einem algebraischen Eigenwertproblem der

Dimension von $\text{tr} V_N$, durch dessen Lösung wir uns eine approximative Bandstruktur $k_{\perp} = \tilde{k}_{\perp}^{(N)}(E, \vec{k}_{\parallel})$ und Näherungswerte $\tilde{b}_{E, \vec{k}_{\parallel}}^{(N)}$ für die Randwerte der zugehörigen Blochwellen verschaffen können (wobei beide natürlich von V_N abhängen!). Es ist für das Folgende zweckmäßig, die so erhaltenen reellen Linien der komplexen Bandstruktur nach E aufgelöst und nach aufsteigenden Energien geordnet in der Form

$$(3.56) \quad E = E_j^{(N)}(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}) \quad (j = 1, 2, \dots)$$

zu beschreiben.

Alternativ können wir für die reelle Bandstruktur Näherungen berechnen, indem wir direkt das Eigenwertproblem

$$(3.57) \quad B_0(\psi_{j, \vec{k}}, \chi) - \varepsilon_j(\vec{k}) \langle \psi_{j, \vec{k}} | \chi \rangle_{\Omega} = 0 \quad \text{für alle } \chi \in K_t^{(1)}(\Omega)$$

auf folgende Weise diskretisieren: Wir wählen die Räume V_N so, daß die Folge von endlichdimensionalen Teilräumen von $K_t^{(1)}(\Omega)$

$$(3.58) \quad U_N := V_N \cap K_t^{(1)}(\Omega) = \{ \varphi \in V_N \mid \varphi_0 = t_0 T \varphi_1 \text{ auf } F_{0,1} \}$$

diesen im Sinne von (B7) intern approximiert. Hinreichend dafür ist beispielsweise, daß es einen Projektor P von $H_t^{(1)}(\Omega)$ auf $K_t^{(1)}(\Omega)$ gibt mit $P(V_N) \subset V_N$; denn liegt χ in $K_t^{(1)}(\Omega)$ und ist $\chi_N \in V_N$ eine Folge, die in $H_t^{(1)}(\Omega)$ gegen χ konvergiert, so ist $P\chi_N \in U_N$ eine Folge, die in $K_t^{(1)}(\Omega)$ gegen $P\chi = \chi$ konvergiert. Die diskrete Eigenwertaufgabe, diejenigen $\psi_{j, \vec{k}}^{(N)} \in U_N$ und $\varepsilon_j^{(N)}(\vec{k}) \in \mathbb{R}$ zu finden mit

$$(3.59) \quad B_0(\psi_{j, \vec{k}}^{(N)}, \chi) - \varepsilon_j^{(N)}(\vec{k}) \langle \psi_{j, \vec{k}}^{(N)} | \chi \rangle_{\Omega} = 0 \quad \text{für alle } \chi \in U_N$$

entspricht dann einem algebraischen Eigenwertproblem der Dimension von U_N . Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt darin, daß zu (A1) und (A2) (siehe S.57/58) analoge Konvergenzsätze gelten; insbesondere konvergieren die der Größe nach geordneten approximativen Energieeigenwerte $\varepsilon_j^{(N)}(\vec{k})$ für jedes j von oben gegen die exakten Eigenwerte $\varepsilon_j(\vec{k})$.

Um den Zusammenhang zwischen beiden Näherungsverfahren herzustellen, setzen wir im Eigenwertproblem (3.55) als Energie $E = E_j^{(N)}(\vec{k})$ ein, wobei $\vec{k}$ reell gewählt ist; einer der Eigenwerte ist dann gerade $t_{\perp}^{(j,N)} = \exp(ik_{\perp}d)$ mit zugehörigem Eigenvektor $b^{(j,N)} \in \text{tr}V_N$. Die approximative Blochwelle

$$(3.60) \quad \varphi_{j,\vec{k}}^{(N)} := G_E^{(N)} b^{(j,N)} \in V_N \quad (E = E_j^{(N)}(\vec{k}))$$

genügt wegen Gl.(3.53) für alle $\chi \in V_N$ der Bedingung

$$(3.61) \quad B_0(\varphi_{j,\vec{k}}^{(N)}, \chi) - E_j^{(N)}(\vec{k}) \langle \varphi_{j,\vec{k}}^{(N)} | \chi \rangle_{\Omega} = \\ = -\alpha (G_E^{(N)} b^{(j,N)} | \chi)_{1/2,F} + \langle b^{(j,N)} | \chi \rangle_F .$$

Für $\chi \in U_N$ im besonderen verschwindet aber die rechte Seite; denn wegen $\chi_R = t_0^T \chi_L$ mit $t_0 = \exp(i\vec{k}\vec{a}_3)$ gilt

$$(3.62) \quad \langle (t_0 T b_L^{(j,N)}, t_0^* T^* b_R^{(j,N)}) | \chi \rangle_F = \langle b^{(j,N)} | \chi \rangle_F$$

und daher wegen Gl.(3.55) mit $E = E_j^{(N)}(\vec{k})$

$$(3.63) \quad \alpha (G_E^{(N)} b^{(j,N)} | \chi)_{1/2,F} = \langle b^{(j,N)} | \chi \rangle_F .$$

Somit löst $\varphi_{j,\vec{k}}^{(N)}$ das diskrete Eigenwertproblem (3.59) zum Eigenwert $E_j^{(N)}(\vec{k})$, sodaß man also mit Hilfe der auf dem komplexen Einheitskreis liegenden Eigenwerte $\tilde{t}_{\perp}$ der diskreten Eigenwertaufgabe (3.55) die reelle Bandstruktur in derselben Weise annähert wie mit der Diskretisierung (3.59): Die approximative Bandstruktur $E_j^{(N)}(\vec{k})$ konvergiert von oben gegen die exakte, und für die Näherungen $\varphi_{j,\vec{k}}^{(N)}$ gilt ebenfalls ein zu (A2) analoger Konvergenzsatz.

3.1.6 Eine kritische Anmerkung zur LTM-Methode

Die attraktive Idee, die Berechnung der komplexen Bandstruktur auf ein in $t_{\perp}$ lineares Eigenwertproblem zurückzuführen, wurde wohl erstmals im Rahmen der auf dem Layer-KKR-Verfahren (/41//42//43//105//106//107/) basierenden Schichttransfermatrixmethode (LTM-Methode; vgl. /33//103//31//104//44/) vorgebracht, die mit dem hier beschriebenen Verfahren eine Reihe formaler Analogien aufweist - handelt es sich doch ebenfalls um eine Greenfunktionsmethode mit einer Zweipunktrandbedingung (1.2), wobei jedoch als Randoperator $\wedge$ der (energieabhängige!) Operator $(-\bar{\Delta} - E)^{1/2}$ auftritt (/41,equ.36/). Um eine korrekte mathematische Formulierung der LTM-Methode zu gewährleisten, ist es allerdings notwendig, dem Potential w Formbeschränkungen aufzuerlegen (strikte Muffin-Tin-Form, Existenz von Äquipotentialebenen zwischen aufeinanderfolgenden Schichten einer Schichtstruktur), sodaß diese per constructionem für eine echt selbstkonsistente Berechnung der elektronischen Struktur ungeeignet ist; doch davon abgesehen wird die LTM-Methode in der von Kambe (/113/), Jepsen & Marcus (/31/) und Pendry (/103//44//96,\$6/) angegebenen Form in der Fachliteratur fast durchweg als gangbarer Weg für Modellrechnungen mit Muffin-Tin-Potentialen dargestellt (/108//13//104//109//110//111//35//112//100//3/).

Das (mathematisch durchaus korrekt) aus dem Layer-KKR-Formalismus abgeleitete Eigenwertproblem für $t_{\perp}$ hat hierbei zunächst eine zu Gl.(3.22) analoge Gestalt " $Pb = t_{\perp}Qb$ " (mit beschränkten Operatoren $P, Q: H \rightarrow H$) und wird dann durch (formales) Invertieren von Q auf die Form " $Q^{-1}Pb = t_{\perp}b$ " gebracht (siehe z.B. /31,p.428,(27)/ oder /44,\$IVB,(4.6)/). In praxi wird die planare Fourierdarstellung ("Beam-Darstellung") der Operatoren P und Q benutzt, und die Eigenwertaufgabe für $t_{\perp}$ wird dadurch diskretisiert, daß man die Matrixdarstellungen von P und Q durch endlichdimensionale Untermatrizen $\tilde{P}$ und $\tilde{Q}$ ersetzt. Nun besitzen aber - aus den nämlichen Gründen wie in Abschnitt 3.1.3 erläutert - weder P noch Q eine beschränkte Inverse, und daher stellen im allgemeinen weder die Matrix $\tilde{Q}^{-1}$ noch $\tilde{Q}^{-1}\tilde{P}$ eine Approximante für einen beschränkten Operator dar (/114,Bd.II,\$10.10//67,\$6.3./). Dies muß schon deshalb so sein, weil $\tilde{Q}^{-1}\tilde{P}$ zu einem längs des Intervalls $[z_L, z_R]$ integrierten Fundamentalsystem der DGl (2.79) äquivalent ist

(/31,p.427,(24)/), sodaß in Anbetracht der Diskussion in Abschnitt 2.2.2 die Konvergenz von $\tilde{Q}^{-1}\tilde{P}$ gegen einen beschränkten Operator ausgeschlossen ist. Es hilft auch nicht weiter, $Q^{-1}P$ als unbeschränkten Operator (mit entsprechend verkleinertem Definitionsbereich $D(Q^{-1}P) \subset H$; siehe /114,Bd.II, §10.10/) zu interpretieren, da dadurch die Menge der Eigenlösungen b im allgemeinen unzulässig verkleinert wird.

Die erstmals offen von Lee & Holzwarth (/37/) geäußerten Zweifel an der numerischen Verlässlichkeit der LTM-Methode in der üblichen Formulierung sind daher voll berechtigt; während diese jedoch vornehmlich die planare Fourierdarstellung selbst als Grund für eine möglicherweise mangelnde Konvergenz des Verfahrens betrachteten und in der Nichtinvertierbarkeit von Q nur die Ursache "einiger Ungenauigkeiten" sahen, ist gerade dieser Umstand dafür verantwortlich, daß mit wachsender Zahl von planaren Fourierkoeffizienten die numerische Genauigkeit bis zur völligen Stellenauslöschung reduziert werden kann, wie man sich schon am Beispiel freier Elektronen und nahezu freier Elektronen ohne Mühe plausibel machen kann und wie es auch eigene "Empty-Lattice"-Testrechnungen bestätigten. Daher schafft auch die von Jepsen (/34/) vorgeschlagene Modifikation der LTM-Methode keine grundsätzliche Abhilfe, solange durch unkritisches algebraisches Manipulieren die angestrebte Form eines Standard-Eigenwertproblems erzwungen wird. Daß die an den Tag gelegte mathematische Sorglosigkeit bei den oben zitierten Modellrechnungen offensichtlich ohne schlimme Konsequenzen blieb, ist nach Meinung des Autors allein dadurch bedingt, daß bei den jeweils diskutierten Materialien und der jeweils zugrunde gelegten Geometrie bereits eine geringe Zahl planarer Fourierkoeffizienten (typischerweise 13-29) zu genügen scheint, um Wellenfunktionen und Bandstruktur mit der behaupteten Genauigkeit zu approximieren; bei den Metallen Al und Cu konnte dies auch durch eigene Rechnungen verifiziert werden (Abschnitt 6.2). Andererseits ist im Falle offenkundiger Diskrepanz zwischen experimentellen und theoretischen Daten (siehe z.B. /115/) ⁴⁶⁾ nach eigenem Wissen kein erfolgreicher Versuch publiziert worden, daß durch größer dimensionierte Matrizen $\tilde{Q}^{-1}$ und $\tilde{Q}^{-1}\tilde{P}$ die Rechengenauigkeit gesteigert werden konnte.

46) Eigene Rechnungen für Al(110) zeigen erst ab 47 planaren Fourierkoeffizienten zufriedenstellende Ergebnisse.

3.2 Die Synthese von Schichtstrukturen

3.2.1 Herleitung der Schichtverknüpfungsgleichungen

Wir wollen uns nun Strukturen zuwenden, die aus einer Folge nicht notwendigerweise identischer Einzelschichten bestehen, und hierbei zunächst die Frage behandeln, wie man aus den Schichtstreumatrizen $S_{E, K_A}^{(A)}$ und $S_{E, K_B}^{(B)}$ zweier aufeinanderfolgender Einzelschichten A und B mit Elementarsäulen

$\Omega^{(A)} = Z \times (z_L, z_M)$ und $\Omega^{(B)} = Z \times (z_M, z_R)$ die Schichtstreumatrix $S_{E, K_{AB}}^{(AB)}$ der kombinierten Schicht AB mit Elementarsäule $\Omega^{(AB)} = Z \times (z_L, z_R)$ gewinnen kann.

Sind an den Randflächen $z = z_R$ und $z = z_L$ Randwerte $b_R = b_R^{(B)} \in H_t^{(1/2)}(Z)$ und $b_L = b_L^{(A)} \in H_t^{(1/2)}(Z)$ vorgegeben, so hat (für Energien $E \notin G^{(AB)}$; vgl. Fußnote 43) die zugehörige Wellenfunktion ψ_b einerseits in $\Omega^{(AB)}$ die Darstellung $\psi_b = G_E^{(AB)} b$, wobei $G_E^{(AB)}$ der Greensche Operator (2.163) für die kombinierte Schicht AB ist. Da ψ_b zu $H_t^{(2)}(\Omega^{(AB)})$ gehört, existieren auf der Querschnittsfläche $z = z_M$ die Größen

$$(3.64) \quad b_R^{(A)} := \lim_{z \rightarrow z_M - 0} (\mathcal{L}\psi_b + \partial_z \psi_b); \quad b_L^{(B)} := \lim_{z \rightarrow z_M + 0} (\mathcal{L}\psi_b - \partial_z \psi_b)$$

sowie

$$(3.65) \quad c_R^{(A)} := \lim_{z \rightarrow z_M - 0} (\mathcal{L}\psi_b - \partial_z \psi_b); \quad c_L^{(B)} := \lim_{z \rightarrow z_M + 0} (\mathcal{L}\psi_b + \partial_z \psi_b)$$

als Elemente von $H_t^{(1/2)}(Z)$; offenkundig gilt dann:

$$(3.66) \quad c_R^{(A)} = b_L^{(B)} \quad \text{und} \quad c_L^{(B)} = b_R^{(A)}$$

In $\Omega^{(A)}$ bzw. $\Omega^{(B)}$ allein läßt sich andererseits (für Energien $E \notin G^{(A)} \cup G^{(B)}$) die Wellenfunktion ψ_b mit Hilfe der Greenschen Operatoren für die Schicht A bzw. B auch in der Form $\psi_b = G_E^{(A)} b^{(A)}$ bzw. $\psi_b = G_E^{(B)} b^{(B)}$ darstellen, woraus man gemäß Gl.(3.18) und (3.19) die Beziehung

$$(3.67) \quad \begin{aligned} c_R^{(A)} &= (\mathcal{R}_R^{(A)} - \text{Id}) b_R^{(A)} + \gamma_{RL}^{(A)} b_L^{(A)} \\ c_L^{(B)} &= (\mathcal{R}_L^{(B)} - \text{Id}) b_L^{(B)} + \gamma_{LR}^{(B)} b_R^{(B)} \end{aligned}$$

gewinnt. Durch Einsetzen von (3.66) folgt:

$$(3.68) \quad \begin{pmatrix} \text{Id} - \mathcal{R}_R^{(A)} & \text{Id} \\ \text{Id} & \text{Id} - \mathcal{R}_L^{(B)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_R^{(A)} \\ b_L^{(B)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_{RL}^{(A)} b_L^{(A)} \\ \gamma_{LR}^{(B)} b_R^{(B)} \end{pmatrix}$$

Der Operator auf der linken Seite ist injektiv: Sind $\hat{b}_R^{(A)}$ und $\hat{b}_L^{(B)}$ Randwerte, welche die linke Seite annullieren, so erzeugen sie eine in $\Omega^{(AB)}$ stückweise definierte Wellenfunktion $\hat{\varphi}^{(A)} = G_E^{(A)}(\hat{b}_R^{(A)}, 0)$, $\hat{\varphi}^{(B)} = G_E^{(B)}(0, \hat{b}_L^{(B)})$ mit der Eigenschaft $\hat{\varphi}^{(A)}|_{Z_M} = \hat{\varphi}^{(B)}|_{Z_M}$ und $\partial_Z \hat{\varphi}^{(A)}|_{Z_M} = \partial_Z \hat{\varphi}^{(B)}|_{Z_M}$. Damit liegt aber $\hat{\varphi}$ im Raum $H_t^{(1)}(\Omega^{(AB)})$ und löst das Einzelschichtproblem (2.118) in $\Omega^{(AB)}$ zu den homogenen Randdaten $b_L^{(A)} = b_R^{(B)} = 0$, woraus wegen $E \notin \mathcal{G}^{(AB)}$ zu schließen ist, daß $\hat{\varphi}$ und damit auch $\hat{b}_R^{(A)}$ und $\hat{b}_L^{(B)}$ gleich Null sein müssen.

Die Auflösung von Gl.(3.68) nach $b_R^{(A)}$ und $b_L^{(B)}$ ist also möglich und lautet:

$$(3.69) \quad \begin{aligned} b_L^{(B)} &= \mathcal{U}_{RL}^{(AB)} ((\mathcal{R}_R^{(A)} - \text{Id}) \gamma_{LR}^{(B)} b_R^{(B)} + \gamma_{RL}^{(A)} b_L^{(A)}) \\ b_R^{(A)} &= \mathcal{U}_{LR}^{(BA)} ((\mathcal{R}_L^{(B)} - \text{Id}) \gamma_{RL}^{(A)} b_L^{(A)} + \gamma_{LR}^{(B)} b_R^{(B)}) \end{aligned}$$

mit

$$(3.70) \quad \begin{aligned} \mathcal{U}_{RL}^{(AB)} &:= (\text{Id} - (\mathcal{R}_R^{(A)} - \text{Id})(\mathcal{R}_L^{(B)} - \text{Id}))^{-1} \\ \mathcal{U}_{LR}^{(BA)} &:= (\text{Id} - (\mathcal{R}_L^{(B)} - \text{Id})(\mathcal{R}_R^{(A)} - \text{Id}))^{-1} \end{aligned}$$

Damit lassen sich die Größen

$$(3.71) \quad c_R^{(B)} := \lim_{z \rightarrow z_R - 0} (\mathcal{L}\psi_b - \partial_z \psi_b) ; \quad c_L^{(A)} := \lim_{z \rightarrow z_L + 0} (\mathcal{L}\psi_b + \partial_z \psi_b)$$

durch Einsetzen von (3.69) in die Beziehung

$$(3.72) \quad c_X^{(Y)} = 2\mathcal{A}(G_E^{(Y)}b_X^{(Y)})_X - b_X^{(Y)} \quad (X = R, L; Y = A, B)$$

allein durch $b_R^{(B)}$ und $b_L^{(A)}$ ausdrücken und man erhält durch Vergleich mit (3.19) schließlich den folgenden Satz von Schichtverknüpfungsgleichungen 47):

$$(3.73) \quad \begin{aligned} \mathcal{R}_R^{(AB)} &= \mathcal{R}_R^{(B)} + \mathcal{T}_{RL}^{(B)} \mathcal{U}_{RL}^{(AB)} (\mathcal{R}_R^{(A)} - \text{Id}) \mathcal{T}_{LR}^{(B)} \\ \mathcal{T}_{RL}^{(AB)} &= \mathcal{T}_{RL}^{(B)} \mathcal{U}_{RL}^{(AB)} \mathcal{T}_{RL}^{(A)} \\ \mathcal{R}_L^{(AB)} &= \mathcal{R}_L^{(A)} + \mathcal{T}_{LR}^{(A)} \mathcal{U}_{LR}^{(BA)} (\mathcal{R}_L^{(B)} - \text{Id}) \mathcal{T}_{LR}^{(A)} \\ \mathcal{T}_{LR}^{(AB)} &= \mathcal{T}_{LR}^{(A)} \mathcal{U}_{LR}^{(BA)} \mathcal{T}_{LR}^{(B)} \end{aligned}$$

Der zweite Satz von Gleichungen entsteht aus dem ersten durch Vertauschen von A mit B und von R mit L. Man rechnet auch ohne Mühe nach, daß die Adjungiertheitsbeziehung (3.27) - wie man erwarten muß - sich auf die durch die Schichtverknüpfung entstehenden Operatoren $G_{XY}^{(AB)}$ überträgt.

Es sei angemerkt, daß die hier benutzte Form (3.66) zur Anpassung der Wellenfunktion an der Querschnittsfläche $z = z_M$ wegen

$$(3.74) \quad \psi|_{z_M=0} = (2\mathcal{A})^{-1}(b_R^{(A)} + c_R^{(A)}) = (2\mathcal{A})^{-1}(b_L^{(B)} + c_L^{(B)}) = \psi|_{z_M=0}$$

$$(3.75) \quad \partial_z \psi|_{z_M=0} = (b_R^{(A)} - c_R^{(A)})/2 = (c_L^{(B)} - b_L^{(B)})/2 = \partial_z \psi|_{z_M=0}$$

als Präzisierung der "Matching"-Bedingung angesehen werden kann, die oftmals von anderen Autoren postuliert wurde (/103, equ.15;/44, p.110;/31, §IV/).

Die sukzessive Anwendung der Schichtverknüpfungsgleichungen gestattet es, Schichtstrukturen mit beliebiger Schichtfolge zu synthetisieren. Damit werden physikalische Systeme der quantitativen (numerischen) Berechnung zugänglich gemacht, die mit einem Gesamtschichtverfahren niemals zu behandeln sind.

47) Man beachte die formale Analogie zu den "Layer Stacking"-Gleichungen der LEED-Theorie (/45, §8.1/).

3.2.2 Die Iteration elementarer Schichtfolgen ('Layer Doubling')

Wird eine Schichtstruktur dadurch erzeugt, daß eine gegebene Einzelschicht A durch Translation um Vielfache eines Vektors $\vec{a}_3$ gemäß Gl.(2.215) periodisch wiederholt wird (wobei man sich u.U. solch eine Schicht A erst durch Verknüpfung von geeigneten Teilschichten verschaffen muß), so vereinfacht sich die Synthese der Gesamtstruktur erheblich. Die Koeffizienten der Schichtstrematrix der um $\vec{a}_3$ transferierten Grundschrift A sind gegeben durch

$$(3.76) \quad \mathcal{R}_X^{(B)} = T(\vec{a}_{3\parallel}) \mathcal{R}_X^{(A)} T(\vec{a}_{3\parallel})^\dagger ; \quad \mathcal{T}_{XY}^{(B)} = T(\vec{a}_{3\parallel}) \mathcal{T}_{XY}^{(A)} T(\vec{a}_{3\parallel})^\dagger \quad (X, Y = R, L);$$

durch Einsetzen in (3.73) erhalten wir die Streukoeffizienten $\mathcal{R}_X^{(1)}$ und $\mathcal{T}_{XY}^{(1)}$ für die kombinierte Schicht

$$(3.77) \quad A^{(1)} := A + (\vec{a}_3 + A)$$

Die Iteration dieses Verdoppelungsprozesses liefert im n-ten Schritt mit der Ersetzung

$$(3.78) \quad \begin{aligned} \mathcal{R}_X^{(A)} &\mapsto \mathcal{R}_X^{(n-1)} ; & \mathcal{R}_X^{(B)} &\mapsto T(n\vec{a}_{3\parallel}) \mathcal{R}_X^{(n-1)} T(n\vec{a}_{3\parallel})^\dagger \\ \mathcal{T}_{XY}^{(A)} &\mapsto \mathcal{T}_{XY}^{(n-1)} ; & \mathcal{T}_{XY}^{(B)} &\mapsto T(n\vec{a}_{3\parallel}) \mathcal{T}_{XY}^{(n-1)} T(n\vec{a}_{3\parallel})^\dagger \end{aligned}$$

die Reflexionskoeffizienten $\mathcal{R}_X^{(n)}$ und Transmissionskoeffizienten $\mathcal{T}_{XY}^{(n)}$ der aus 2^n Grundschriften bestehenden Schicht

$$(3.79) \quad A^{(n)} := \sum_{k=0}^{2^n-1} (k\vec{a}_3 + A)$$

in völliger Analogie zum Schichtverdoppelungsverfahren im LEED-Formalismus (/44,§IVF;/45,ch.8/).

Läßt sich $\vec{a}_3$ so wählen, daß $n \cdot \vec{a}_{3\parallel}$ für eine geeignete natürliche Zahl $n \in \mathbb{N}$ ein planarer Gittervektor ist, vereinfacht sich wegen

$$(3.80) \quad \tilde{T}(\vec{a}_{3\parallel})^n = \text{Id} \quad \text{mit} \quad \tilde{T}(\vec{a}_{3\parallel}) := \exp(i\vec{k}_{\parallel} \vec{a}_{3\parallel}) T(\vec{a}_{3\parallel})$$

ab dem n-ten Schritt die Rekursion zu

$$(3.81) \quad \begin{aligned} \mathcal{R}_X^{(n+1)} &= \mathcal{R}_X^{(n)} + \gamma_{XY}^{(n)} \mathcal{U}_{XY}^{(n)} (\mathcal{R}_X^{(n)} - \text{Id}) \gamma_{YX}^{(n)} \\ \gamma_{XY}^{(n+1)} &= \gamma_{XY}^{(n)} \mathcal{U}_{XY}^{(n)} \gamma_{XY}^{(n)} \end{aligned} \quad (X, Y = R, L)$$

wobei

$$(3.82) \quad \mathcal{U}_{XY}^{(n)} = (\text{Id} - (\mathcal{R}_X^{(n)} - \text{Id})(\mathcal{R}_Y^{(n)} - \text{Id}))^{-1}.$$

Ist überdies die Grundschicht A spiegelsymmetrisch und liegt $2\vec{a}_{3\parallel}$ im Ortsgitter G_2 , so gilt aufgrund der Beziehungen (3.47) und (3.48)

$$(3.83) \quad \mathcal{R}_R^{(A)} = \mathcal{R}_L^{(A)} =: \mathcal{R} ; \quad \gamma_{RL}^{(A)} = \gamma_{LR}^{(A)} =: \gamma.$$

Durch Induktion über n läßt sich dann zeigen:

$$(3.84) \quad \mathcal{R}_R^{(n)} = \tilde{\gamma}(\vec{a}_{3\parallel}) \mathcal{R}_L^{(n)} \tilde{\gamma}(\vec{a}_{3\parallel}) ; \quad \gamma_{RL}^{(n)} = \tilde{\gamma}(\vec{a}_{3\parallel}) \gamma_{LR}^{(n)} \tilde{\gamma}(\vec{a}_{3\parallel})$$

Die Rekursion (3.81) reduziert sich dann auf

$$(3.85) \quad \begin{aligned} \mathcal{R}_L^{(n+1)} &= F(\mathcal{R}_L^{(n)}, \gamma_{LR}^{(n)} \tilde{\gamma}) \\ \gamma_{LR}^{(n+1)} \tilde{\gamma} &= G(\mathcal{R}_L^{(n)}, \gamma_{LR}^{(n)} \tilde{\gamma}) \end{aligned}$$

mit den Operationsvorschriften

$$(3.86) \quad \begin{aligned} F(X, Y) &:= X + Y \cdot U(X)^{-1} (\tilde{\gamma} \cdot X \cdot \tilde{\gamma} - \text{Id}) \cdot Y \\ G(X, Y) &:= Y \cdot U(X)^{-1} \tilde{\gamma} \cdot Y \end{aligned}$$

und

$$(3.87) \quad U(X) := \text{Id} - (\tilde{\gamma} \cdot X \cdot \tilde{\gamma} - \text{Id})(X - \text{Id})$$

($\tilde{\gamma}$ steht abkürzend für $\tilde{\gamma}(\vec{a}_{3\parallel})$),

wobei der Rekursionsbeginn gegeben ist durch

$$(3.88) \quad \mathcal{R}_L^{(1)} = F(\mathcal{R}, \mathcal{T}) ; \quad \mathcal{T}_{LR}^{(1)} = G(\mathcal{R}, \mathcal{T}) \quad .$$

3.2.3 Das asymptotische Verhalten des Reflexions- und Transmissionsoperators (Stromsummenregel)

Um die intuitive Vorstellung, mit fortschreitender Schichtverdoppelung werde ein idealer Halbraum generiert, quantitativ fassen zu können, ist es notwendig zu untersuchen, welche Größen bei diesem Prozeß ein Konvergenzverhalten zeigen und damit als Maß für die Güte der Halbraumapproximation dienen können. Von den Reflexions- und Transmissionskoeffizienten $\mathcal{R}_X^{(n)}$ und $\mathcal{T}_{XY}^{(n)}$ selbst läßt sich im Falle, daß zur betrachteten Energie propagierende Blochwellen (Im $k_\perp = 0$) existieren, (leider) kein Limes bilden, jedenfalls nicht im Sinne eines einfachen Operatorkonvergenzbegriffs; dies ist leicht am Beispiel freier Elektronen zu illustrieren. Doch es werden durch $\mathcal{T}_{XY}^{(n)}$ gewisse endlichdimensionale Teilräume von $L_2(Z)$ ausgezeichnet, charakterisiert durch ihre Orthogonalprojektoren $Q^{(n)}$, welche einem Grenzwert zustreben. Die Herleitung der Konstruktionsvorschrift für diese Projektoren ist hierbei insofern heuristisch, als einige Schlußfolgerungen auf Dichtheitsargumenten basieren, deren Gültigkeit zwar plausibel, aber doch spekulativ ist, und auch insofern, als wir einige physikalisch "vernünftige" Annahmen über die Verteilung der reellen Linien über der komplexen $k_\perp$ -Ebene machen müssen, um die Konvergenz der Projektoren $Q^{(n)}$ zu sichern. Da man sich diese jedoch bei konkreten Anwendungen stets aus den zu einer gegebenen Energie E existierenden (endlich vielen) propagierenden Blochwellen explizite konstruieren kann, hat die Konvergenz der Folge $Q^{(n)}$ postulatorischen Charakter und ist im Einzelfall nachzuprüfen. Ersetzt man bei den im folgenden vollzogenen Überlegungen alle auftretenden Größen jeweils durch Näherungen im Sinne einer konsistenten Approximation gemäß Abschnitt 3.1.5, so gelangt man - bedingt durch die Endlichdimensionalität der involvierten Räume - zu einer mathematisch rigorosen Argumentation, sodaß bei numerischen Rechnungen keine Konvergenzprobleme zu erwarten sind.

Wir wollen annehmen, daß sich die Eigenwerte $t_{\perp}^{(\nu)}$ der Eigenwertaufgabe (3.22) mit ganzzahligen Indizes $\nu \in \mathbb{Z}^* = \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ anordnen lassen in der Form

$$(3.89) \quad \dots \leq |t_{\perp}^{(-2)}| \leq |t_{\perp}^{(-1)}| \leq 1 \leq |t_{\perp}^{(1)}| \leq |t_{\perp}^{(2)}| = \dots,$$

wobei gelten möge:

$$(3.90) \quad \lim_{\nu \rightarrow -\infty} |t_{\perp}^{(\nu)}| = 0 \quad ; \quad \lim_{\nu \rightarrow +\infty} |t_{\perp}^{(\nu)}|^{-1} = 0$$

Ausgeschlossen sind also die pathologischen Fälle, daß ein Energieband längs eines ganzen Intervalles der $k_{\perp}$ -Achse den konstanten Wert E annimmt (/61, Vol. IV, ch. XIII.16. Lemma 2/) oder daß die Menge der Schnittpunkte der reellen Linien mit der Ebene $E = \text{constans}$ einen Häufungspunkt besitzt. Die zu $t_{\perp}^{(\nu)}$ zugehörigen Eigenvektoren $b^{(\nu)}$ seien in der $L_2(F)$ -Norm gleichmäßig normiert:

$$(3.91) \quad \|b^{(\nu)}\|_{L_2(F)} \leq C \quad \text{für alle } \nu \in \mathbb{Z}^*$$

Durch Induktion über n verifiziert man, daß die Randvorgabe

$$(3.92) \quad b_n^{(\nu)} := \begin{cases} ((t_{\perp}^{(\nu)})^N \tilde{t})^{N_R^{(\nu)}} b_L^{(\nu)}, & \text{falls } |t_{\perp}^{(\nu)}| < 1 \\ (\tilde{t}^{N_R^{(\nu)}} (t_{\perp}^{(\nu)})^{-N_R^{(\nu)}}) b_L^{(\nu)}, & \text{falls } |t_{\perp}^{(\nu)}| > 1 \end{cases}$$

(mit $N := N(n) := 2^n - 1$; $n \in \mathbb{N}$)

auf der n -fach reduplizierten Grundschicht $A^{(n)}$ dieselbe Blochwelle erzeugt wie der Randwert $b^{(\nu)}$ auf der Grundschicht A . Die Übertragungsfaktoren $t_{\perp}^{(\nu)}$ sind hierbei gerade so angeordnet, daß die $b_n^{(\nu)}$ wegen

$$(3.93) \quad \|b_{n+1}^{(\nu)}\|_{L_2(F)} \leq \|b_n^{(\nu)}\|_{L_2(F)} \quad (n \in \mathbb{N})$$

ebenfalls gleichmäßig beschränkt sind; hierdurch wird der physikalischen Vorstellung Rechnung getragen, daß die Beiträge verallgemeinerter Blochlösungen zur Wellenfunktion im Kristallinneren kein exponentielles Wachstum zeigen dürfen.

Aus der Eigenwertgleichung (3.23) läßt sich dann ohne Mühe herleiten, daß für festes n folgende Grenzwertsätze gelten (mit $N = 2^n - 1$):

$$(3.94) \quad \lim_{\nu \rightarrow -\infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^{1-N} G_{RL}^{(n)} b_L^{(\nu)} = 0$$

$$(3.95) \quad \lim_{\nu \rightarrow +\infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^{N-1} G_{LR}^{(n)} \tilde{T}^N b_R^{(\nu)} = 0$$

$$(3.96) \quad \lim_{\nu \rightarrow -\infty} \mathcal{L}^{-1} b_R^{(\nu)} = 0 \quad ; \quad \lim_{\nu \rightarrow +\infty} \mathcal{L}^{-1} b_L^{(\nu)} = 0$$

$$(3.97) \quad \lim_{\nu \rightarrow -\infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^{-N} (\tilde{T} (G_{LL}^{(n)} - (2\lambda)^{-1}) t_{\perp}^{(\nu)} b_L^{(\nu)} - (2\lambda)^{-1} b_R^{(\nu)}) = 0$$

$$(3.98) \quad \lim_{\nu \rightarrow +\infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^N ((G_{RR}^{(n)} - (2\lambda)^{-1}) (t_{\perp}^{(\nu)})^{-1} \tilde{T}^N b_R^{(\nu)} - (2\lambda)^{-1} \tilde{T}^{N+1} b_L^{(\nu)}) = 0$$

(alle Limiten sind in $H_t^{(1/2)}(Z)$ und damit auch in $L_2(Z)$ zu verstehen; Gl.(3.96) besagt daher die Konvergenz von $b_R^{(\nu)}$ bzw. $b_L^{(\nu)}$ in $H_t^{(-1/2)}(Z)$).

Um das asymptotische Verhalten $n \rightarrow \infty$ beschreiben zu können, führen wir mit

$$(3.99) \quad H_b := \left\{ u \in L_2(F) \mid (\|G_{XY}^{(n)} u_Y\|_{L_2(Z)})_{n \in \mathbb{N}} \text{ ist beschränkt } (X, Y=R, L) \right\}$$

den Raum derjenigen Funktionen u ein, für welche die Folgen $(G_{XY}^{(n)} u_Y)_{n \in \mathbb{N}}$ überhaupt nur konvergent sein können. Aus (3.23) folgt dann für alle $u \in H_b$

i) Für $|t_{\perp}^{(\nu)}| < 1$ bleibt $((t_{\perp}^{(\nu)})^{-2^n} \langle u_R | G_{RL}^{(n)} b_L^{(\nu)} \rangle_Z)_{n \in \mathbb{N}}$ beschränkt und es gilt:

$$(3.100) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^{-2^{n-1}} \langle u_R | G_{RL}^{(n)} b_L^{(\nu)} \rangle_Z = 0$$

$$(3.101) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^{-2^{n-1}} \langle u_L | G_{LL}^{(n)} b_L^{(\nu)} - (2\lambda)^{-1} (b_L^{(\nu)} + (t_{\perp}^{(\nu)} \tilde{T})^{-1} b_R^{(\nu)}) \rangle_Z = 0$$

ii) Für $|t_{\perp}^{(\nu)}| > 1$ bleibt $((t_{\perp}^{(\nu)})^2)^n \langle u_L | G_{LR}^{(n)} \tilde{\gamma}_{b_R}^{N_{b_R}^{(\nu)}} \rangle_Z \in \mathbb{N}$ beschränkt und es gilt:

$$(3.102) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^2 n^{-1} \langle u_L | G_{LR}^{(n)} \tilde{\gamma}_{b_R}^{N_{b_R}^{(\nu)}} \rangle_Z = 0$$

$$(3.103) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} (t_{\perp}^{(\nu)})^2 n^{-1} \langle u_R | G_{RR}^{(n)} \tilde{\gamma}_{b_R}^{N_{b_R}^{(\nu)}} - (2\wedge)^{-1} \tilde{\gamma}_{b_R}^{N_{b_R}^{(\nu)}} + t_{\perp}^{(\nu)} \tilde{\gamma}_{b_L}^{N_{b_L}^{(\nu)}} \rangle_Z = 0$$

Den Schlüssel für eine weitergehende Charakterisierung der Asymptotik stellt die Folge der "Stromoperatoren"

$$(3.104) \quad \mathcal{G}^{(n)} : L_2(F) \rightarrow L_2(F), \quad \mathcal{G}^{(n)} := \begin{pmatrix} 0 & -iG_{RL}^{(n)} \\ iG_{LR}^{(n)} & 0 \end{pmatrix} \quad (n \in \mathbb{N})$$

dar. $\mathcal{G}^{(n)}$ ist selbstadjungiert und beschränkt (vgl. Abschnitt 3.1.4) 48) und wird gerade von der Sesquilinearform (3.35) erzeugt, weswegen die zu seinen Eigenvektoren b gehörigen elektronischen Zustände $\psi_b = G^{(n)} b$ einen Wahrscheinlichkeitsstrom I_b besitzen, der bis auf einen Normierungsfaktor mit dem Eigenwert λ_b übereinstimmt:

$$(3.105) \quad I_b = \lambda_b \cdot \|b\|_{L_2(F)}^2 / \|G^{(n)} b\|_{L_2(\Omega^{(n)})}^2$$

Mit Hilfe von $\mathcal{G}^{(n)}$ verschaffen wir uns mit

$$(3.106) \quad d_n^{(\nu)} := \mathcal{G}^{(n)} b_n^{(\nu)} \quad (\nu \in \mathbb{Z}^*)$$

eine Menge von Vektoren in $L_2(F)$, die wegen Gl.(3.38) in folgendem Sinne dual zur Menge der $b_n^{(\nu)}$ ist:

$$(3.107) \quad \langle d_n^{(\nu)} | b_n^{(\mu)} \rangle_F = I(b_n^{(\nu)}, b_n^{(\mu)}) = \begin{cases} I_{\nu\mu}^{(n)}, & \text{falls } t_{\perp}^{(\nu)*} = t_{\perp}^{(\mu)-1} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für eine kompakte Schreibweise ist es zweckmäßig, auf $\mathbb{Z}^*$ die Äquivalenzrelation

$$(3.108) \quad \mu \sim \nu : \Leftrightarrow t_{\perp}^{(\mu)} = t_{\perp}^{(\nu)} \quad \text{oder} \quad t_{\perp}^{(\mu)*} = (t_{\perp}^{(\nu)})^{-1}$$

48) Allgemeiner läßt sich der Stromoperator als selbstadjungierter beschränkter Operator in $H_t^{-1/2}(F)$ definieren, indem man in Def.(3.104) $G_{XY}^{(n)}$ durch $\tilde{\gamma}_{XY}^{(n)}$ ersetzt.

einzuführen; die zu μ gehörende Äquivalenzklasse sei mit Z_μ bezeichnet. Falls außer der Symmetrie (3.9) keine zusätzliche energetische Entartung vorliegt, sind die Äquivalenzklassen Z_μ für $|t_\perp^{(\mu)}| = 1$ einelementig und für $|t_\perp^{(\mu)}| \neq 1$ zweielementig; in jedem Fall wollen wir jedoch voraussetzen, daß alle Z_μ endlich sind und ihre Mächtigkeit gleichmäßig beschränkt ist:

$$(3.109) \quad Z_\mu := \text{card}(Z_\mu) \leq c < \infty \quad (\mu \in \mathbb{Z}^*)$$

Weiterhin wollen wir nur solche $(E, \vec{k}_\parallel)$ -Werte in Betracht ziehen, für welche die "Strommatrizen"

$$(3.110) \quad \mathfrak{Y}_{Z_\mu}^{(0)} := (I_{\lambda\nu}^{(0)})_{\lambda, \nu \in Z_\mu}$$

invertierbar sind⁴⁹⁾; in diesem Falle impliziert Gl.(3.107) die lineare Unabhängigkeit sowohl der Menge $\{b^{(\nu)} | \nu \in \mathbb{Z}^*\}$ als auch der Menge $\{d^{(\nu)} | \nu \in \mathbb{Z}^*\}$.

Für die Matrixelemente $I_{\nu\mu}^{(n)}$ läßt sich aus Gl.(3.36) und (3.92) schließen:

$$(3.111) \quad I_{\nu\mu}^{(n)} = (t_\perp^{(\nu)*})^{\varepsilon_\nu N} I_{\nu\mu}^{(0)}$$

(mit $N = 2^n - 1$; $\varepsilon_\nu := \text{sgn}(1 - |t_\perp^{(\nu)}|)$, wobei $\text{sgn}(0) := 0$);

daher transformieren sich die Strommatrizen beim Schichtverdoppelungsprozeß gemäß

$$(3.112) \quad \mathfrak{Y}_{Z_\mu}^{(n)} = \mathfrak{A}_{Z_\mu}^{(n)} \mathfrak{Y}_{Z_\mu}^{(0)}$$

mit der invertierbaren Diagonalmatrix

$$(3.113) \quad \mathfrak{A}_{Z_\mu}^{(n)} = \text{diag} ((t_\perp^{(\nu)*})^{\varepsilon_\nu N} ; \nu \in Z_\mu) ,$$

weswegen $\{b_n^{(\nu)} | \nu \in \mathbb{Z}^*\}$ und $\{d_n^{(\nu)} | \nu \in \mathbb{Z}^*\}$ ebenfalls linear unabhängig sind. Für die Inversen folgt dann

$$(3.114) \quad c_{Z_\mu}^{(n)} := (\mathfrak{Y}_{Z_\mu}^{(n)})^{-1} = c_{Z_\mu}^{(0)} (\mathfrak{A}_{Z_\mu}^{(n)})^{-1}$$

49) Diese Bedingung ist beispielsweise verletzt, wenn die eindimensionale reelle Bandstruktur $k_\perp \mapsto \varepsilon_j(\vec{k}_\parallel, k_\perp)$ bei der betrachteten Energie E ein Extremum besitzt (vgl. (3.45)).

Die endlichdimensionalen Operatoren in $L_2(F)$

$$(3.115) \quad g_{\mu}^{(n)} := \sum_{\nu \in \mathbb{Z}_{\mu}} |d_n^{(\mu)}\rangle (c_{Z\mu}^{(n)})_{\mu\nu} \langle d_n^{(\nu)}|$$

lassen sich darstellen als

$$(3.116) \quad g_{\mu}^{(n)} = \sum_{\nu \in \mathbb{Z}_{\mu}} |D_n^{(\mu)}\rangle (c_{Z\mu}^{(0)})_{\mu\nu} g_n^{(\mu)} \langle D_n^{(\nu)}|$$

mit

$$(3.117) \quad D_n^{(\nu)} := (t_{\perp}^{(\nu)})^{\varepsilon_{\nu}(1-N)} d_n^{(\nu)}$$

und

$$(3.118) \quad g_n^{(\mu)} := (t_{\perp}^{(\mu)})^{\varepsilon_{\mu}(N-2)}$$

Aufgrund der Grenzwertsätze (3.94) und (3.95) sowie der Bedingung (3.91) sind die Vektoren $D_n^{(\nu)}$ (und damit natürlich auch die $d_n^{(\nu)}$) bezüglich ν beschränkt; der Betrag von $g_n^{(\mu)}$ ist exponentiell gedämpft gemäß

$$(3.119) \quad |g_n^{(\mu)}| = \exp(-|\operatorname{Im} k_{\perp}^{(\mu)}| d(2^n - 3))$$

Machen wir über die verallgemeinerten Blochlösungen die (physikalisch sicher vernünftige) Annahme, daß für hinreichend große n gilt

$$(3.120) \quad \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^*} \operatorname{lub}_{\infty} (c_{Z\mu}^{(0)}) |g_n^{(\mu)}| < \infty \quad (n \geq n_0)$$

($\operatorname{lub}_{\infty}$ bezeichnet die Zeilensummenorm),
so konvergiert die Reihe

$$(3.121) \quad \hat{g}^{(n)} := \sum_{\mu \in \mathbb{Z}^*} g_{\mu}^{(n)}$$

in der Operatornorm und stellt einen vollstetigen selbstadjungierten Operator $L_2(F) \rightarrow L_2(F)$ dar (/57, ch.X, §2/). Unter der im folgenden unterstellten Prämisse, daß die Menge $\{b_n^{(\nu)} | \nu \in \mathbb{Z}^*\}$ total in $L_2(F)$ ist ⁵⁰⁾, ist der

50) "Indizien" für diese Hypothese finden sich bei Heine (/8/).

Operator $\hat{g}^{(n)}$ identisch mit dem Stromoperator $g^{(n)}$, denn die Matrixelemente von $g^{(n)}$ und $\hat{g}^{(n)}$ auf der Menge $\{b_n^{(\nu)} \mid \nu \in \mathbb{Z}^*\}$ stimmen überein (/62, ch.III, Lemma 3.6/):

$$(3.122) \quad \begin{aligned} \langle b_n^{(\lambda)} | \hat{g}^{(n)} | b_n^{(\kappa)} \rangle_F &= \sum_{\lambda \sim \mu \sim \nu \sim \kappa} (\gamma_{Z_\mu}^{(n)})_{\lambda\mu} (c_{Z_\mu}^{(n)})_{\mu\nu} (\gamma_{Z_\kappa}^{(n)})_{\nu\kappa} = \\ (\gamma_{Z_\kappa}^{(n)})_{\lambda\kappa} \delta_{Z_\lambda Z_\kappa} &= I_{Z_\kappa}^{(n)} = \langle b_n^{(\lambda)} | g^{(n)} | b_n^{(\kappa)} \rangle_F \end{aligned}$$

Als vollstetiger selbstadjungierter Operator besitzt $g^{(n)}$ dann ein rein diskretes Spektrum reeller Eigenwerte; physikalisch interpretiert bedeutet dies, daß die "scharfen" Erwartungswerte des WS-Stromes zu vorgegebenen Werten von E und $\vec{k}_n$ quantisiert sind und die zugehörigen elektronischen Zustände ein vollständiges System von Basiszuständen bilden (/114, Bd.II, §12.3/).

Unterstellen wir weiter, daß der Raum der "evanescent waves"

$$(3.123) \quad H_{ev} := \overline{\text{span} \{ b^{(\nu)} ; |t_\perp^{(\nu)}| \neq 1 \}}^{L_2(F)}$$

in H_b enthalten ist (d.h. daß die nicht propagierenden Blochwellen ein "physikalisch vernünftiges" Abklingverhalten zeigen), so läßt sich aus Gl.(3.23) die Beschränktheit der Folgen

$$(3.124) \quad ((t_\perp^{(\nu)})^{-2n} G_{RL}^{(n)} b_L^{(\nu)})_{n \in \mathbb{N}} \quad \text{für } |t_\perp^{(\nu)}| < 1$$

$$(3.125) \quad ((t_\perp^{(\nu)})^{2n} G_{LR}^{(n)} b_R^{(\nu)})_{n \in \mathbb{N}} \quad \text{für } |t_\perp^{(\nu)}| > 1$$

ableiten; mit Hilfe des Prinzips der gleichmäßigen Beschränktheit (Banach-Steinhaus) gewinnt man dann eine Schranke R , mit der für einen hinreichend großen Exponenten q die Folge $(t_\perp^{(\nu)})^{\varepsilon_{\nu q}} D_n^{(\nu)}$ bezüglich beider Indizes abzuschätzen ist:

$$(3.126) \quad |t_\perp^{(\nu)}|^{\varepsilon_{\nu q}} \|D_n^{(\nu)}\|_{L_2(F)} \leq R \quad (n \in \mathbb{N}, \nu \in \mathbb{Z}^*)$$

Zerlegt man den Stromoperator in $g^{(n)} = g_p^{(n)} + g_{ev}^{(n)}$ mit

$$(3.127) \quad \mathcal{G}_p^{(n)} := \sum_{|t_{\perp}^{(\nu)}| = 1} \mathcal{G}_{\nu}^{(n)} ; \quad \mathcal{G}_{ev}^{(n)} := \sum_{|t_{\perp}^{(\nu)}| \neq 1} \mathcal{G}_{\nu}^{(n)} ,$$

und definiert den Abklingfaktor t_{ev} gemäß

$$(3.128) \quad t_{ev} := \max \left\{ e^{-|\operatorname{Im} k_{\perp}^{(\nu)}|d} ; |t_{\perp}^{(\nu)}| \neq 1 \right\} ,$$

so gilt wegen

$$(3.129) \quad |g_n^{(\nu)}| \leq |g_{n_0}^{(\nu)}| \cdot t_{ev}^{2^{n-n_0}} \quad (n > n_0, |t_{\perp}^{(\nu)}| \neq 1)$$

und aufgrund der oben genannten Abschätzung für genügend große n folgende Ungleichung für die Operatornorm von $\mathcal{G}_{ev}^{(n)}$:

$$(3.130) \quad \|\mathcal{G}_{ev}^{(n)}\| \leq \operatorname{const}(n_0) \cdot t_{ev}^{2^{n-n_0}} \quad (n > n_0)$$

Der von den "evanescent waves" erzeugte Anteil des Stromoperators konvergiert somit in der Norm gegen Null, wobei die Konvergenzgeschwindigkeit durch t_{ev} bestimmt ist, d.h. vom Abstand der der Volumenbandstruktur nächstgelegenen reellen Linie der komplexen Bandstruktur mit $\operatorname{Im} k_{\perp} \neq 0$ bei der Energie E . Daher wird die Konvergenz von $\mathcal{G}_{ev}^{(n)}$ desto langsamer, je näher die betrachtete Energie E an eines der Extrema der Volumenbandstruktur rückt, die ja ausdrücklich aus der Diskussion ausgeschlossen waren (vgl. Fußnote 49).

Der von den propagierenden Blochwellen erzeugte Anteil $\mathcal{G}_p^{(n)}$ des Stromoperators - ein nur noch endlichdimensionaler Operator (vgl. (3.90)) - zeigt hingegen im allgemeinen für $n \rightarrow \infty$ ein oszillatorisches Verhalten. Daher ist es zweckmäßig, aus den Randdaten diejenige Komponente, welche nicht im Kern von $\mathcal{G}_p^{(n)}$ liegt, mit Hilfe des Projektors

$$(3.131) \quad \Pi_p^{(n)} := \sum_{Z \in P} \sum_{\mu \sim \nu} |b_n^{(\mu)}\rangle (c_Z^{(o)})_{\mu\nu} \langle d_n^{(\nu)}|$$

($P :=$ Menge der Äquivalenzklassen mit $|t_{\perp}^{(\nu)}| = 1$)
abzuseparieren; wegen

$$(3.132) \quad \mathcal{G}_{ev}^{(n)} = \mathcal{G}^{(n)} - \mathcal{G}_p^{(n)} = \mathcal{G}^{(n)} (\operatorname{Id} - \Pi_p^{(n)})$$

konvergiert dann $\mathcal{Q}^{(n)}$ auf der Bildmenge von $\text{Id} - \Pi_p^{(n)}$ gegen Null. Nun ist aber

$$(3.133) \quad R(\text{Id} - \Pi_p^{(n)}) = R(\Pi_p^{(n)+})^\perp = \{ d_n^{(\nu)} ; |t_\perp^{(\nu)}| = 1 \}^\perp$$

und nach (3.107) identifiziert man

$$(3.134) \quad \{ d_n^{(\nu)} ; |t_\perp^{(\nu)}| = 1 \}^\perp = H_{\text{ev}}^{(n)} := \overline{\text{span} \{ b_n^{(\nu)} ; |t_\perp^{(\nu)}| \neq 1 \}}^{L_2(F)},$$

sodaß also das asymptotische Verhalten von $R(\text{Id} - \Pi_p^{(n)})$ durch das der "evanescent waves" charakterisiert werden kann.

Führen wir - dem üblichen Vorgehen in der Theorie des dreidimensional unendlich ausgedehnten kristallinen Festkörpers folgend - Born-von Kármánsche Randbedingungen (/83,p.62;/61,Vol.IV,p.313/) und eine damit kompatible quasikontinuierliche Abzählung der $\vec{k}$ -Vektoren ein, so gilt für hinreichend große Werte von n

$$(3.135) \quad \tilde{T}^{2^n-1} = \tilde{T}^+.$$

Die Randwerte der verallgemeinerten Blochwellen streben daher für $n \rightarrow \infty$ folgenden Grenzwerten zu:

$$(3.136) \quad b_\infty^{(\nu)} := \lim_{n \rightarrow \infty} b_n^{(\nu)} = \begin{cases} (0, b_L^{(\nu)}) & , \text{ falls } |t_\perp^{(\nu)}| < 1 \\ (\tilde{T}^+ b_R^{(\nu)}, 0) & , \text{ falls } |t_\perp^{(\nu)}| > 1 \end{cases}$$

Im Falle einer endlichdimensionalen Approximation impliziert dies die Konvergenz der Folge der Orthogonalprojektoren $P_{\text{ev}}^{(n)}$ auf $H_{\text{ev}}^{(n)}$ gegen den Orthogonalprojektor $P_{\text{ev}}^{(\infty)}$ auf den Raum

$$(3.137) \quad H_{\text{ev}}^{(\infty)} := \overline{\text{span} \{ b_\infty^{(\nu)} ; |t_\perp^{(\nu)}| \neq 1 \}}^{L_2(F)} ;$$

im unendlichdimensionalen Fall liegt die Vermutung nahe, daß $P_{\text{ev}}^{(\infty)}$ der starke Graphenlimes (/61,Vol.I,pp.293-294/) der Folge $P_{\text{ev}}^{(n)}$ ist. Dies

unterstellt, konvergieren die Projektoren $P_{ev}^{(n)}$ aufgrund ihrer Selbstadjungiertheit auch im Sinne starker Resolventenkonvergenz gegen $P_{ev}^{(\infty)}$ und damit sogar im Sinne starker Konvergenz (/61, Vol. I, thm. VIII.20/). Hieraus ergibt sich die für die konkrete Anwendung wichtige Konsequenz, daß die Folge der (endlichdimensionalen) Orthogonalprojektoren

$$(3.138) \quad P_p^{(n)} := Id - P_{ev}^{(n)}$$

auf $H_{ev}^{(n)\perp} = \text{span} \{ d_n^{(\nu)} ; |t_{\perp}^{(\nu)}| = 1 \}$ stark gegen den Projektor $P_p^{(\infty)} := Id - P_{ev}^{(\infty)}$ konvergiert; unter der physikalisch zu motivierenden Annahme, daß die Dimension von $R(P_p^{(\infty)})$ endlich ist, folgt sogar die Konvergenz in der Operatornorm (/62, ch. VIII, Lemmata 1.23 & 1.24/). Mit Hilfe von Gl.(3.132) gewinnt man dann die Normkonvergenz von $Q_p^{(n)} P_{ev}^{(n)}$:

$$(3.139) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_p^{(n)} P_{ev}^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} Q_{ev}^{(n)} (Id - P_p^{(n)}) = 0$$

Im Hinblick auf die folgenden Abschnitte sind speziell beschränkte Folgen von Randwerten der Form $b_n = (0, u_L^{(n)})^T$ mit der Eigenschaft

$$(3.140) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} G_{RL}^{(n)} u_L^{(n)} = 0$$

von Interesse. Bezeichnen wir mit

$$(3.141) \quad s_n^{(\nu)} := i G_{LR}^{(n)} b_{n,R}^{(\nu)}$$

die "linke" Komponente von $d_n^{(\nu)} = (r_n^{(\nu)}, s_n^{(\nu)})^T$, so ist aufgrund von Gl.(3.139) offensichtlich eine hinreichende Bedingung für die Gültigkeit der Beziehung (3.140) gegeben durch

$$(3.142) \quad u_L^{(n)} \in L_{ev}^{(n)} := \{ s_n^{(\nu)} ; |t_{\perp}^{(\nu)}| = 1 \}^{\perp} \subset L_2(Z)$$

Die Orthogonalprojektoren $Q_{ev}^{(n)}$ auf $L_{ev}^{(n)}$ stehen mit $P_p^{(n)}$ in folgendem Zusammenhang: Sei

$$(3.143) \quad P_L : L_2(F) \longrightarrow L_2(Z) ; (u_R, u_L)^T \longmapsto u_L$$

der Projektor auf die linke Komponente und

$$(3.144) \quad P_L^* : L_2(Z) \longrightarrow L_2(F) , u_L \longmapsto (0, u_L)^T$$

seine Adjungierte. Da $P_p^{(n)}$ die Darstellung

$$(3.145) \quad P_p^{(n)} = \sum_{|t^{(\mu)}|=|t^{(\nu)}|=1} |d_n^{(\mu)}\rangle \gamma_{\mu\nu}^{(n)} \langle d_n^{(\nu)}|$$

mit der hermiteschen positiv definiten Matrix $\gamma^{(n)} := (\langle d_n^{(\mu)} | d_n^{(\nu)} \rangle)^{-1}$ besitzt, läßt sich der nicht-negative selbstadjungierte Operator $P_L P_p^{(n)} P_L^*$ in der Form

$$(3.146) \quad P_L P_p^{(n)} P_L^* = \sum_{|t^{(\mu)}|=|t^{(\nu)}|=1} |s_n^{(\mu)}\rangle \gamma_{\mu\nu}^{(n)} \langle s_n^{(\nu)}|$$

schreiben. Daher gilt

$$(3.147) \quad \text{Kern}(P_L P_p^{(n)} P_L^*) = R(P_L P_p^{(n)} P_L^*)^\perp = L_{\text{ev}}^{(n)} ,$$

d.h. $Q_{\text{ev}}^{(n)}$ ist der Eigenprojektor von $P_L P_p^{(n)} P_L^*$ zum Eigenwert 0. Wegen der Normkonvergenz der Folge $P_L P_p^{(n)} P_L^*$ konvergiert dann aber $Q_{\text{ev}}^{(n)}$ in der Norm gegen $Q_{\text{ev}}^{(\infty)}$, den Orthogonalprojektor auf $\text{Kern}(P_L P_p^{(\infty)} P_L^*)$ (/61, Vol.I, thm.VIII.23/).

Für die konkrete Anwendung ist es zweckmäßig, statt $Q_{\text{ev}}^{(n)}$ die (endlich-dimensionalen) Orthogonalprojektoren

$$(3.148) \quad Q_p^{(n)} := \text{Id} - Q_{\text{ev}}^{(n)}$$

auf $L_{\text{ev}}^{(n)\perp} = \text{span}\{s_n^{(\nu)} ; |t_\perp^{(\nu)}|=1\}$ zu betrachten. Verschafft man sich durch Orthonormalisierung der Vektoren $s_n^{(\nu)}$ nach dem Schmidtschen Verfahren eine Orthonormalbasis $\{e_n^{(\nu)}\}$ von $L_{\text{ev}}^{(n)\perp}$, so läßt sich $Q_p^{(n)}$ darstellen

gemäß 51)

$$(3.149) \quad Q_p^{(n)} = \sum_{\nu=1}^G |e_n^{(\nu)}\rangle \langle e_n^{(\nu)}| \quad (G := \dim L_{ev}^{(n)\perp}).$$

Die Bedingung (3.142) lautet dann

$$(3.150) \quad Q_p^{(n)} u_L^{(n)} = 0$$

oder - äquivalent dazu -

$$(3.151) \quad \langle e_n^{(\nu)} | u_L^{(n)} \rangle_Z = 0 \quad (\nu = 1, \dots, G).$$

Die ohne großen Aufwand zu konstruierenden Projektoren $Q_p^{(n)}$ können zudem als Maß für die Güte der Halbraumapproximation verwendet werden, indem man mit fortschreitender Schichtverdoppelung den Abstand $\|Q_p^{(n+1)} - Q_p^{(n)}\|$ kontrolliert.

Aus dem asymptotischen Verhalten des Stromoperators lassen sich noch einige weitere, vor allem im Hinblick auf ihre physikalische Interpretation wichtige Schlüsse ziehen. Hierzu transformieren wir zunächst die (hermiteschen) Strommatrizen $\mathcal{J}_Z^{(0)}$ der propagierenden Blochwellen (d.h. für $Z \in P$) vermöge unitärer Matrizen β_Z auf reelle Diagonalgestalt gemäß

$$(3.152) \quad \mathcal{J}_Z^{(0)} = \beta_Z \text{diag}(I_{\mu_1}, \dots, I_{\mu_Z}) \beta_Z^+.$$

Die entsprechende Transformation der Blochwellen lautet dann

$$(3.153) \quad \tilde{b}^{(2)} = \sum_{\mu \in Z} (\beta_Z)_{\mu 2} b^{(\mu)}$$

und führt auf folgende Darstellung von $\mathcal{J}_p^{(n)}$:

$$(3.154) \quad \mathcal{J}_p^{(n)} = \sum_{\mu=1}^p |\tilde{d}_n^{(\mu)}\rangle \frac{1}{I_\mu} \langle \tilde{d}_n^{(\mu)}| \quad (\text{mit } p := \dim H_{ev}^{(n)\perp})$$

51) Man beachte, daß wegen $Q_p^{(n)} \rightarrow \text{Id} - Q_{ev}^{(\infty)}$ für $n \rightarrow \infty$ die Dimension für hinreichend große n konstant ist (/62, ch.VIII, Lemma 1.23/ oder /67, Satz 4.35/)

Wie in Anhang 8 näher erläutert wird, stimmt die Zahl der positiven Ströme I_μ mit der der negativen überein (Stromsummenregel)⁵²; präziser ausgedrückt ist

$$(3.155) \quad \text{card} \{ \mu ; I_\mu > 0 \} = \text{card} \{ \mu ; I_\mu < 0 \} = \sigma = p/2$$

und es gilt für hinreichend großes n

$$(3.156) \quad L_{\text{ev}}^{(n)\perp} = \text{span} \{ \tilde{s}_n^{(\nu)} ; I_\nu > 0 \} = \text{span} \{ \tilde{s}_n^{(\nu)} ; I_\nu < 0 \} \quad ,$$

sodaß man sich bei der Konstruktion der Projektoren $Q_p^{(n)}$ auf die Orthogonalisierung der Vektoren $\tilde{s}_n^{(\nu)}$ eines der beiden Stromvorzeichen beschränken kann.

Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß die Konvergenz der Projektoren $Q_p^{(n)}$ bzw. $Q_{\text{ev}}^{(n)}$ nahe legt, daß auch die Folge der für die nachfolgenden Betrachtungen wichtigen Operatoren $\mathcal{R}_L^{(n)} Q_{\text{ev}}^{(n)}$ ein konvergentes Verhalten zeigt. Da per constructionem

$$(3.157) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{V}_{\text{RL}}^{(n)} Q_{\text{ev}}^{(n)} = 0$$

gilt, läßt die Form der Rekursion (3.73) bzw. (3.81) dies erwarten, sofern nur die Konvergenzgeschwindigkeit der Nullfolge $\mathcal{V}_{\text{RL}}^{(n)} Q_{\text{ev}}^{(n)}$ groß genug ist; es erscheint plausibel, daß sich das bei $Q_{\text{ev}}^{(n)}$ festzustellende exponentielle Abklingverhalten gemäß (3.130) auf diese überträgt und damit die Konvergenz der Folge $\mathcal{R}_L^{(n)} Q_{\text{ev}}^{(n)}$ sichert⁵³.

52) Dieser Sachverhalt wird vielfach implizite vorausgesetzt; erstmals scheint sich Bross (/102/) mit der Begründung der Stromsummenregel beschäftigt zu haben.

53) Bei konkreten Anwendungen wurde vom Autor stets die Konvergenz verifiziert, wobei die Konvergenzgeschwindigkeit durch t_{ev} bestimmt wurde (vgl. (3.128)-(3.130)).

3.3 Die Konstruktion der Gesamtlösung aus den asymptotischen Randvorgaben

3.3.1 Die Behandlung des Außenraumes eines kristallinen Halbraumes

Im folgenden wollen wir uns speziellen Schichtstrukturen zuwenden, den kristallinen Halbräumen mit "realer" Oberfläche. Diese sind dadurch zu charakterisieren, daß in der Halbsäule $Z \times (z_B, \infty)$ nur periodisch wiederholte identische Einzelschichten vorkommen ("Bulk", "Volumenbereich") und in der Halbsäule $Z \times (-\infty, z_V)$ (mit $z_V \leq z_B$) ein nur von z abhängiges Potential

$$(3.158) \quad w(\vec{r}) = V(z) \quad \text{für } z \leq z_V$$

auftritt ("Außenraum", "Vakuumbereich"), von dem vorausgesetzt sei, daß es stückweise stetig ist und für $z \rightarrow -\infty$ von unten einem Vakuumniveau V_{Vac} zustrebt. Der Bereich $Z \times (z_V, z_B)$ beschreibt die physikalische Oberfläche des Halbraumes; man kann ihn sich erzeugt denken durch die Synthese weniger, im allgemeinen verschiedener Einzelschichten, wobei Oberflächeneffekte wie Relaxation und Rekonstruktion oder Adsorbatschichten berücksichtigt werden können.

Zur Bestimmung der elektronischen Wellenfunktionen für den gesamten kristallinen Halbraum sind zunächst drei Teilprobleme zu lösen:

- i) Die Konstruktion der Streumatrix für den Oberflächenbereich und für eine Folge von Volumeneinzelschichten, die den halbseitig unendlich ausgedehnten Kristall genügend gut approximiert.
- ii) Die Berechnung der Randwerte $b^{(\nu)}$ der propagierenden Blochlösungen; diese dienen zur Charakterisierung des asymptotischen Verhaltens der Wellenfunktionen "tief im Volumen".
- iii) Die explizite Konstruktion der Lösungsmannigfaltigkeit der Schrödinger-Gleichung im Außenraum, wobei die dem jeweils betrachteten physikalischen Prozeß entsprechende Asymptotik für $z \rightarrow -\infty$ zu erfüllen ist.

Das Vorgehen zur Lösung von Punkt i) und ii) wurde bereits eingehend dargestellt; die dritte Teilaufgabe läßt sich folgendermaßen behandeln:

Durch Separation der Variablen gewinnt man die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung (2.2) mit planarer Blochbedingung (2.4) bzw. (2.18) im Außenraum $z \leq z_V$ zur vorgegebenen Energie E in Form einer planaren Fourierdarstellung

$$(3.159) \quad \psi^{(V)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} u(\eta_{\vec{g}}, z) w_{\vec{g}}(\vec{r}_n)$$

(vgl. Def.(2.41)), wobei $u(\eta, z)$ die allgemeine Lösung der DGL

$$(3.160) \quad \frac{d^2}{dz^2} u(\eta, z) = (V(z) + \eta) u(\eta, z) \quad (z \leq z_V)$$

bezeichnet und $\eta_{\vec{g}}$ definiert ist als

$$(3.161) \quad \eta_{\vec{g}} := |\vec{k}_n + \vec{g}|^2 - E \quad (\vec{g} \in G_2^*) .$$

Damit die Fourierreihe (3.159) auf der Querschnittsfläche $F_V = Z \times \{z_V\}$ eine Funktion aus $H_t^{(s)}(Z)$ darstellt (mit $1/2 \leq s \leq 3/2$ entsprechend der geforderten Regularität der Wellenfunktion im Oberflächen- und Volumenbereich), sind die planaren Fourierkoeffizienten der Bedingung

$$(3.162) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^s |u(\eta_{\vec{g}}, z_V)|^2 < \infty$$

zu unterwerfen (vgl. Beh.3.1 in Anhang 3). Weitere Bedingungen an $u(\eta, z)$ ergeben sich aus dem asymptotischen Verhalten für $z \rightarrow -\infty$: Ist $\eta > -V_{\text{vac}}$ (dies ist stets der Fall für Energien $E < V_{\text{vac}}$ (gebundene Zustände)), so wird der (zweidimensionale) Lösungsraum der DGL (3.160) von zwei Funktionen aufgespannt, deren eine für $z \rightarrow -\infty$ abklingt, während die andere unbeschränkt ist. Um ein physikalisch sinnvolles Ergebnis zu erhalten, muß $u(\eta, z)$ proportional zur abklingenden Lösung gewählt werden. Falls $\eta < -V_{\text{vac}}$ (dies kann nur für endlich viele $\eta_{\vec{g}}$ eintreten), zeigen beide Funktionen eines Fundamentalsystems zur DGL (3.160) oszillatorisches Verhalten, sodaß zur Beschreibung eines physikalischen Prozesses im allgemeinen eine Linearkombination von beiden zu bilden ist (Streuzustände). Somit

bringt also jeder planare Gittervektor mit $\eta_{\vec{g}} < -V_{\text{vac}}$ zwei Freiheitsgrade in die allgemeine Lösung (3.159) ein, während mit $\eta_{\vec{g}} > -V_{\text{vac}}$ nur ein Freiheitsgrad verbunden ist.

3.3.2 Die Anschlußbedingungen

Die der jeweils vorliegenden physikalischen Situation entsprechenden elektronischen Zustände eines kristallinen Halbraumes werden dadurch festgelegt, daß deren asymptotisches Verhalten im Kristallinneren mit der im letzten Abschnitt beschriebenen Darstellung im Außenraum auf folgende Weise verknüpft wird:

Es seien $G_{XY}^{(n)}$ bzw. $\mathcal{R}_X^{(n)}$ und $\mathcal{T}_{XY}^{(n)}$ ($X, Y = R, L$) die Reflexions- und Transmissionsoperatoren der eine hinreichend große Zahl von Volumeneinzelschichten repräsentierenden Säule $Z \times (z_B, z_n)$ (mit $z_n = z_B + 2^n d$). Ferner sei $\psi^{(S)}$ die den elektronischen Zustand im Oberflächen- und Vakuumbereich $z \leq z_B$ darstellende Wellenfunktion; auf der Randfläche $z = z_B$ besitze sie die Randwerte $\psi_R^{(S)} = \psi^{(S)}|_{z_B}$ bzw. $c_R^{(S)} = (\mathcal{L} - \partial_z)\psi^{(S)}|_{z_B}$. Tief im Volumen können wir die "evanescent waves" als nahezu abgeklungen betrachten, sodaß für $z \gg z_n$ die Wellenfunktion im Volumenbereich $\psi^{(B)}$ mit wachsendem n mehr und mehr einer Linearkombination der zu den betrachteten Werten von $(E, \vec{k}_n)$ existierenden 2σ propagierenden Blochwellen

$$(3.163) \quad \psi_n^{(P)} = \sum_{\mu=1}^{2\sigma} \alpha_{\mu}^n \psi^{(\mu)}$$

gleichet, deren Randwerte $\psi_{n,R}^{(P)} = \psi_n^{(P)}|_{z_n}$ bzw. $b_{n,R}^{(P)} = (\mathcal{L} + \partial_z)\psi_n^{(P)}|_{z_n}$ auf dem Querschnitt $z = z_n$ den Beziehungen

$$(3.164) \quad b_{n,R}^{(P)} = \sum_{\mu=1}^{2\sigma} \alpha_{\mu}^n (t^{(\mu)}_T)^{2^n-1} b_R^{(\mu)}$$

(vgl. (3.92)) und

$$(3.165) \quad \psi_{n,R}^{(P)} = G_{RR}^{(n)} b_{n,R}^{(P)} + G_{RL}^{(n)} b_{n,L}^{(P)}$$

mit

$$(3.166) \quad b_{n,L}^{(P)} = \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu}^n b_L^{(\mu)}$$

genügen. Demzufolge machen wir für den Randwert $b_{n,R}^{(B)} = (\mathcal{A} + \partial_z) \psi^{(B)}|_{z_n}$ den Ansatz

$$(3.167) \quad b_{n,R}^{(B)} = b_{n,R}^{(P)}$$

und fordern, daß

$$(3.168) \quad \psi_{n,R}^{(B)} = \psi^{(B)}|_{z_n} = G_{RR}^{(n)} b_{n,R}^{(B)} + G_{RL}^{(n)} c_R^{(S)}$$

im Limes $n \rightarrow \infty$ mit $\psi_{n,R}^{(P)}$ übereinstimmt; dies bedeutet

$$(3.169) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} G_{RL}^{(n)} (c_R^{(S)} - b_{n,L}^{(P)}) = 0$$

und führt auf die erste von zwei Anschlußbedingungen:

$$(3.170) \quad Q_P^{(n)} (c_R^{(S)} - \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} b_L^{(\mu)}) = 0$$

(vgl. (3.140)-(3.151)).

Auf der Querschnittsfläche $z = z_B$ gilt

$$(3.171) \quad 2\mathcal{A} \psi_R^{(S)} = \mathcal{R}_L^{(n)} c_R^{(S)} + \gamma_{LR}^{(n)} b_{n,R}^{(B)} ;$$

unter Benutzung des Ansatzes (3.167), der Eigenwertgleichung (3.22) und der Bedingung (3.170) läßt sich diese Gleichung umformen zu

$$(3.172) \quad 2\mathcal{A} \psi_R^{(S)} = \mathcal{R}_L^{(n)} Q_{ev}^{(n)} (c_R^{(S)} - \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} b_L^{(\mu)}) + \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} (b_L^{(\mu)} + (t^{(\mu)} T)^{-1} b_R^{(\mu)}) ;$$

dies ist die zweite Anschlußbedingung. Beachtet man, daß der zweite Term auf der rechten Seite gerade $2\mathcal{A} \psi_L^{(P)}$ darstellt, so gestatten Gl.(3.170) und (3.172) die physikalisch anschauliche Interpretation, daß der im Kristallinneren propagierende Anteil $\psi^{(P)}$ der Wellenfunktion gerade so beschaffen sein muß, daß die vom Oberflächenbereich ins Innere des Kristalls transmittierte Differenzfunktion $\psi^{(S)} - \psi^{(P)}$ asymptotisch verschwindet und daher beim Übergang vom Oberflächenbereich in den Volumenbereich

allein durch die Reflexionseigenschaften des (idealen) Kristalls bestimmt wird. Bemerkenswert ist, daß das bei numerischen Rechnungen problematische explizite Auftreten der "evanescent waves" bei der hier angegebenen Formulierung vermieden wird; deren Einfluß beschränkt sich allein auf die Konvergenzgeschwindigkeit von $Q_p^{(n)}$ bzw. $\mathcal{R}_L^{(n)} Q_{ev}^{(n)}$ (siehe Abschnitt 3.2.3).

Abgesehen vom Fall $z_V = z_B$ (idealer Halbraum) ist nun noch der Zusammenhang zwischen den im allgemeinen unbekannten Größen $\psi_R^{(S)}$ und $c_R^{(S)}$ und der nach Gl.(3.158) als bekannt anzusehenden Form der Wellenfunktion im Vakuumbereich $\psi^{(V)}$ herzustellen. Dies leisten die Reflexions- und Transmissionsoperatoren $\mathcal{R}_X^{(S)}$ und $\mathcal{T}_{XY}^{(S)}$ ($X, Y = R, L$) des Oberflächenbereiches $z_V \leq z \leq z_B$, mit denen sich analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.2.1 die Größe $c_R^{(S)}$ durch den Randwert $c_R^{(V)} = (\mathcal{A} - \partial_z) \psi^{(V)}|_{z_V}$ auf dem Querschnitt $z = z_V$ und durch die propagierenden Blochwellen im Volumenbereich ausdrücken läßt:

$$(3.173) \quad c_R^{(S)} = \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} b_L^{(\mu)} + \mathcal{U}_{RL}^{(SB)} (\mathcal{T}_{RL}^{(S)} c_R^{(V)} + \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} ((\mathcal{R}_R^{(S)} - \text{Id})(t^{(\mu)T})^{-1} b_R^{(\mu)} - b_L^{(\mu)}))$$

(mit $\mathcal{U}_{RL}^{(SB)}$ gemäß Def.(3.70)).

Eingesetzt in Gl.(3.170) ergibt sich damit als erste Beziehung zwischen $c_R^{(V)}$ und den das asymptotische Verhalten im Kristallinneren charakterisierenden Koeffizienten $(\alpha_1, \dots, \alpha_{2G}) := \underline{\alpha}$ eine Gleichung der Gestalt

$$(3.174) \quad \mathcal{Q} c_R^{(V)} - \mathcal{P} \underline{\alpha} = 0 \quad ,$$

mit endlichdimensionalen linearen Operatoren $\mathcal{Q}$ und $\mathcal{P}$ des Ranges G (mit Werten in $R(Q_{ev}^{(\infty)})^{\perp}$), deren explizite Darstellung offenkundig, aber im weiteren nicht von Interesse ist. In ähnlicher Weise läßt sich auch der Term $2\mathcal{A} \psi_R^{(S)}$ in Gl.(3.172) eliminieren und man erhält als zweite Gleichung zwischen $c_R^{(V)}$ und $\underline{\alpha}$

$$(3.175) \quad (Id + \mathcal{R}_R^{(S)} \mathcal{U}_{LR}^{(BS)})(\mathcal{R}_L^{(n)} - Id) - \mathcal{R}_L^{(n)} \mathcal{U}_{RL}^{(SB)})(\mathcal{T}_{RL}^{(S)} c_R^{(V)} - \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} b_L^{(\mu)}) =$$

$$(Id + \mathcal{R}_L^{(n)} \mathcal{U}_{RL}^{(SB)})(\mathcal{R}_R^{(S)} - Id) - \mathcal{R}_R^{(S)} \mathcal{U}_{LR}^{(BS)})(\sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{\mu} (t^{(\mu)T})^{-1} b_R^{(\mu)}),$$

abgekürzt geschrieben als

$$(3.176) \quad \mathcal{M} c_R^{(V)} - \mathcal{N} \underline{\alpha} = 0 \quad .$$

Die elektronischen Zustände des gesamten kristallinen Halbraumes sind somit durch die Bestimmungsgleichung

$$(3.177) \quad \mathcal{H} \begin{pmatrix} c_R^{(V)} \\ \underline{\alpha} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} \mathcal{M}, \mathcal{N} \\ \mathcal{Q}, \mathcal{P} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_R^{(V)} \\ \underline{\alpha} \end{pmatrix} = 0$$

gegeben.

3.3.3 Zur gruppentheoretischen Klassifikation der Lösungen des Gesamtproblems

Grundlegend für die Klassifikation der Lösungen des Halbraumproblems nach ihrem Symmetrieverhalten ist die Tatsache, daß diese für feste Werte von E und $\vec{k}_{||}$ einen Darstellungsraum zu einer irreduziblen Darstellung der planaren "kleinen Gruppe"

$$(3.178) \quad \overline{\mathcal{G}}_{\vec{k}_{||}} := \{ S \in \tilde{\mathcal{G}} \mid S \vec{k}_{||} = \vec{k}_{||} \bmod \tilde{\mathcal{G}}_2^* \text{ und } S \vec{e}_z = \vec{e}_z \}$$

aufspannen; hierbei ist $\tilde{\mathcal{G}}$ die Punktgruppe der aus Volumen- und Oberflächenschichten bestehenden Struktur, deren planare Translationssymmetrie durch das Ortsgitter $\tilde{\mathcal{G}}_2$ charakterisiert wird. Im allgemeinen ist $\tilde{\mathcal{G}}_2$ eine Untergruppe des planaren Ortsgitters $\mathcal{G}_2$ einer Volumeneinzelschicht, sodaß die reziproken Gitter in der Relation

$$(3.179) \quad \mathcal{G}_2^* \hookrightarrow \tilde{\mathcal{G}}_2^*$$

stehen. Da ferner im allgemeinen die Raumgruppe $\tilde{\mathcal{R}}$ des kristallinen Halbraumes eine Untergruppe der Raumgruppe $\mathcal{R}$ des Volumenbereiches ist, folgt für die Punktgruppe $\tilde{\mathcal{G}}$ die Beziehung

$$(3.180) \quad \tilde{g} \subset g, \quad ,$$

wobei g die Punktgruppe eines in drei Dimensionen unendlich ausgedehnten, aus Volumeneinzelschichten aufgebauten Kristalls bezeichnet (siehe (2.215)-(2.216)). Dessen reziprokes Raumgitter G_3^* hat wiederum die Eigenschaft, daß seine Orthogonalprojektion auf die Ebenen planarer Translationssymmetrie gerade mit G_2^* zusammenfällt:

$$(3.181) \quad P_{\parallel} G_3^* = G_2^* \quad (P_{\parallel} := 1 - \vec{e}_z \otimes \vec{e}_z)$$

Damit wird einsichtig, daß im allgemeinen die bei der Klassifikation der Blochwellen auftretende kleine Gruppe $g_{\vec{k}_{\parallel}}$ (vgl. (3.11)-(3.12)) nicht mit $\overline{g}_{\vec{k}_{\parallel}}$ verglichen werden kann, was bedeutet, daß die Symmetrie der Wellenfunktionen im Kristallinneren nicht zur Beschreibung der Symmetrie der Lösungen des Halbraumproblems benutzt werden kann.

Im Falle jedoch, daß die Punktgruppen g und $\tilde{g}$ identisch sind (z.B. bei einem idealen Halbraum), gilt die Inklusion

$$(3.182) \quad g_{\vec{k}_{\parallel}} \hookrightarrow \overline{g}_{\vec{k}_{\parallel}}$$

mit der Konsequenz, daß es zwischen den irreduziblen Darstellungen beider Gruppen Kompatibilitätsbeziehungen gibt, weswegen mit der Symmetrie eines elektronischen Zustandes nur ganz bestimmte Blochwellen im Volumenbereich verträglich sind. Die für fcc(100)-Oberflächen relevanten Kompatibilitätsrelationen zusammen mit den Charakteren der jeweiligen irreduziblen Darstellungen von $\overline{g}_{\vec{k}_{\parallel}}$ sind in Tab.3.3 angegeben.

Tab.3.3: Charaktertafel und Kompatibilitätsrelationen für die (100) - Oberfläche eines fcc-Kristalls

bulk	$\bar{\Gamma}$	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	$\bar{M}$	bulk
Δ_1	$\bar{\Gamma}_1$	1	1	1	1	1	$\bar{M}_1$	Z_1
Δ_1'	$\bar{\Gamma}_2$	1	1	1	-1	-1	$\bar{M}_2$	Z_2
Δ_2'	$\bar{\Gamma}_3$	1	1	-1	1	-1	$\bar{M}_3$	Z_2
Δ_2	$\bar{\Gamma}_4$	1	1	-1	-1	1	$\bar{M}_4$	Z_1
Δ_5	$\bar{\Gamma}_5$	2	-2	0	0	0	$\bar{M}_5$	$Z_3 \oplus Z_4$

bulk	$\bar{X}$	E	C_2	σ_v	$\sigma_{v'}$
+	$\bar{X}_1$	1	1	1	1
-	$\bar{X}_2$	1	1	-1	-1
+	$\bar{X}_3$	1	-1	1	-1
-	$\bar{X}_4$	1	-1	-1	1

(Die Bezeichnung der Spiegelungen ist hierbei so gewählt, daß gilt:
 $\sigma_v(\bar{X}) = \bar{X}$, $\sigma_d(\bar{M}) = \bar{M}$).

4. Die Dichte der durch eine Oberfläche gebundenen elektronischen Zustände von Schichtstrukturen

4.1 Klassifikation der gebundenen Zustände

4.1.1 Oberflächenadaptierte Volumenzustände

In einem kristallinen Halbraum mit realer Oberfläche können für Energien E unterhalb des Vakuumniveaus V_{vac} nur gebundene Zustände existieren (siehe Abschnitt 3.3.1). Die z -Abhängigkeit der planaren Fourierkoeffizienten $u(\eta_{\vec{q}}, z)$ der Wellenfunktion $\psi^{(V)}$ im Außenraum ist in diesem Fall durch die DGl (3.160) bis auf einen skalaren Faktor eindeutig festgelegt, sodaß $\psi^{(V)}$ zu dem von ihr auf der Querschnittsfläche $z = z_V$ angenommenen Randwert $c_R^{(V)} = (\mathcal{A} - \mathcal{B}_Z) \psi^{(V)}|_{z_V}$ in einer eindeutigen Beziehung steht.

Daher wollen wir den Raum der Wellenfunktionen $\psi^{(V)}$ mit dem Raum der Randwerte $c_R^{(V)}$ (d.h. Bedingung (3.162) entsprechend mit $H_t^{(s-1)}(z)$) identifizieren.

Die Dimension des von den zu E und $\vec{k}_{\parallel}$ existierenden propagierenden Blochwellen erzeugten Raumes sei mit $p(E, \vec{k}_{\parallel}) = 2G(E, \vec{k}_{\parallel})$ bezeichnet. Ist

$G(E, \vec{k}_{\parallel}) > 0$, so repräsentiert eine Lösung $(c_R^{(V)}, \underline{\alpha})^T$ der Bestimmungsgleichung (3.177) einen an die Kristalloberfläche adaptierten Volumenzustand, wenn der Koeffizientenvektor $\underline{\alpha}$ von Null verschieden ist. Um den von diesen Zuständen aufgespannten Lösungsraum zu parametrisieren, wählen wir für die Blochwellen eine Basis $\{b^{(\mu)}\}$ gemäß Gl.(3.153) und indizieren hierbei in der Weise, daß $b^{(1)}, \dots, b^{(G)}$ einen positiven und $b^{(G+1)}, \dots, b^{(2G)}$ einen negativen WS-Strom besitzen. Der Koeffizientenvektor $\underline{\alpha}$ wird dementsprechend zerlegt in

$$(4.1) \quad \underline{\alpha}_+ := (\alpha_1, \dots, \alpha_G)^T; \quad \underline{\alpha}_- := (\alpha_{G+1}, \dots, \alpha_{2G})^T,$$

sodaß sich Gl.(3.174) nun in Form eines dazu äquivalenten linearen Gleichungssystems

$$(4.2) \quad \mathcal{P}_+ \underline{\alpha}_+ + \mathcal{P}_- \underline{\alpha}_- = (q_1(c_R^{(V)}), \dots, q_G(c_R^{(V)}))$$

schreiben läßt mit $G \times G$ -Matrizen $\mathcal{P}_\kappa$ ($\kappa = +, -$) und Linearformen $q_1, \dots, q_G$ auf $H_t^{(s-1)}(Z)$. Unter der physikalisch begründeten Annahme, daß $\mathcal{P}_-$ (bis auf diskrete $(E, \vec{k}_\parallel)$ -Werte) invertierbar ist (/102/), können wir dieses Gleichungssystem nach $\underline{\alpha}_-$ auflösen und in Gl.(3.176) einsetzen; man gewinnt so eine lineare Beziehung der Gestalt

$$(4.3) \quad M_{E, \vec{k}_\parallel} c_R^{(V)} = N_{E, \vec{k}_\parallel} \underline{\alpha}_+$$

mit $H_t^{(s-1)}(Z)$ -wertigen linearen Operatoren $M_{E, \vec{k}_\parallel}$ und $N_{E, \vec{k}_\parallel}$. Die Invertierbarkeit von $M_{E, \vec{k}_\parallel}$ am zugrunde gelegten $(E, \vec{k}_\parallel)$ -Wert vorausgesetzt, vermittelt diese Gleichung eine Parameterdarstellung $\underline{\alpha}_+ \mapsto c_R^{(V)}$ des Lösungsraumes der Bestimmungsgleichung (3.177); insbesondere ist also der Raum der oberflächenadaptierten Volumenzustände $G(E, \vec{k}_\parallel)$ -dimensional.

4.1.2 Oberflächenzustände und -resonanzen

Lösungen von Gl.(3.177) mit $\underline{\alpha}_- = 0$ kennzeichnen Oberflächenzustände (/6;/7;/8/), denn die zugehörigen Wellenfunktionen werden im Volumenbereich mit dem Abklingfaktor t_{ev} (siehe (3.128)) gedämpft, sodaß die WS-Dichte dieser Zustände im wesentlichen auf den Oberflächenbereich und einige benachbarte Volumenschichten konzentriert ist. Befindet man sich energetisch in einer absoluten Bandlücke der projizierten Bandstruktur (vgl. (2.229)), d.h. gilt $G(E, \vec{k}_\parallel) = 0$, so reduziert sich Gl.(3.177) auf

$$(4.4) \quad M_{E, \vec{k}_\parallel} c_R^{(V)} = 0 \quad ;$$

im Falle $G(E, \vec{k}_\parallel) > 0$ treten noch die Gleichungen

$$(4.5) \quad q_1(c_R^{(V)}) = \dots = q_G(c_R^{(V)}) = 0$$

daneben. Von Null verschiedene Lösungen $c_R^{(V)}$ existieren im allgemeinen nur für diskrete Werte von E und $\vec{k}_\parallel$, die sich als zweidimensionale Energiebänder

$$(4.6) \quad \overline{BZ}_1 \ni \vec{k}_\parallel \mapsto E_j^{ss}(\vec{k}_\parallel) \quad (j = 1, 2, \dots)$$

darstellen lassen, welche die planare Dispersion der Oberflächenzustände beschreiben.

Im Unterschied zu den durch die Bedingung $G(E, \vec{k}_\parallel) = 0$ charakterisierten "absoluten" Oberflächenzuständen existieren im Falle eines Oberflächenzustandes mit $G(E, \vec{k}_\parallel) > 0$ neben diesem auch noch Volumenzustände, von denen dieser durch ein physikalisches Experiment nur dann zu unterscheiden ist, wenn er eine andere Symmetrie besitzt als jene. Dies bedeutet, daß bei Energien mit $G(E, \vec{k}_\parallel) > 0$ nur solche Oberflächenzustände physikalisch relevant sind, die aufgrund ihrer Symmetrie in eine relative Bandlücke der projizierten Bandstruktur fallen (d.h. daß es bei der betrachteten Energie keine propagierenden Blochwellen gibt, deren (Volumen-)Symmetrie mit der (Halbraum-)Symmetrie des Oberflächenzustandes kompatibel ist; siehe Abschnitt 3.3.3); wir wollen sie als "relative" Oberflächenzustände bezeichnen. Falls jedoch zu einem Oberflächenzustand auch propagierende Blochwellen mit kompatibler Symmetrie existieren, ist experimentell eine Mischung beider zu beobachten, sodaß man besser den nun noch zu diskutierenden Begriff der "Oberflächenresonanz" verwenden sollte.

Dem üblichen Vorgehen folgend (/64/; /4, §4.2.3/) bezeichnen wir mit Oberflächenresonanz einen elektronischen Halbraumzustand, dessen Wellenfunktion in einer Umgebung des Oberflächenbereiches eine deutlich größere Amplitude als im Volumen aufweist, ohne daß sie aber im Volumenbereich asymptotisch verschwindet. Neben der oben betrachteten Situation liegt eine Oberflächenresonanz dann vor, wenn die Bestimmungsgleichungen (4.4) und (4.5) "nahezu" erfüllt sind, was damit gleichbedeutend ist, daß der "Matching-Operator" $M_{E, \vec{k}_\parallel}$ in Gl.(4.3) "fast" singularär ist. Die Vollstetigkeit von $M_{E, \vec{k}_\parallel}$ vorausgesetzt, wird diese Forderung durch die Bedingung präzisiert, daß der kleinste Singularwert $\kappa_{\min}(E, \vec{k}_\parallel)$ von $M_{E, \vec{k}_\parallel}$ (/61, Vol.I, thm.VI.17/) bei der Energie einer Oberflächenresonanz ein Minimum besitzt.

Zu beachten ist, daß die Differenzierung in relative Oberflächenzustände und Oberflächenresonanzen nur dann physikalisch sinnvoll ist, wenn der planare Ausbreitungsvektor $\vec{k}_\parallel$ elektronischer Halbraumzustände mit hinreichend großem Auflösungsvermögen analysiert werden kann. Da relative Bandlücken nur längs hochsymmetrischer $\vec{k}_\parallel$ -Richtungen existieren, geht ein relativer Oberflächenzustand in eine Resonanz über, wenn sich bei Variation des $\vec{k}_\parallel$ -Vektors dessen Symmetrie erniedrigt (/64/). Je nach Art des zu beschreibenden Experiments ist daher zu überlegen, inwieweit die stets involvierten $\vec{k}_\parallel$ -Mittelungsprozesse eine Unterscheidung in Oberflächenzustand und -resonanz gerechtfertigt erscheinen lassen (siehe z.B. /112/).

4.2 Der Begriff der Oberflächenzustandsdichte

4.2.1 Das Maß im Phasenraum (Stromnormierung)

Nachdem wir einen qualitativen Überblick über die gebundenen Halbraumzustände gewonnen haben, ist nun zu klären, wie diese energetisch verteilt sind. Wesentlich ist hierzu der im folgenden entwickelte Begriff der Oberflächenzustandsdichte⁵⁴⁾, mit dessen Hilfe sich die Änderung der elektronischen Zustandsdichte des dreidimensional unendlich ausgedehnten Kristalls durch das Vorhandensein einer Oberfläche beschreiben läßt.

Zunächst soll eine Vorschrift zur Abzählung der gebundenen Halbraumzustände abgeleitet werden; in engem Zusammenhang damit steht die Frage nach deren Normierung. Die zu $\vec{k}_\parallel$ existierenden Oberflächenzustände $\psi_{j,\vec{k}_\parallel}^{SS}$ mit Energie $E_j^{SS}(\vec{k}_\parallel)$ lassen sich gemäß

$$(4.7) \quad \int_{Z \times R} |\psi_{j,\vec{k}_\parallel}^{SS}|^2 d^2 r_\parallel dz = 1$$

normieren mit der Konsequenz, daß die Orthogonalitätsrelation

$$(4.8) \quad \int_{R^3} \psi_{j',\vec{k}_\parallel'}^* \psi_{j,\vec{k}_\parallel} d^3 r = \frac{(2\pi)^2}{A} \delta_{j,j'} \delta(\vec{k}_\parallel' - \vec{k}_\parallel)$$

erfüllt ist. Demzufolge ist die auf die Säule $Z \times R$ bezogene $\vec{k}_\parallel$ -aufgelöste Zustandsdichte gegeben durch

$$(4.9) \quad N^{SS}(E, \vec{k}_\parallel) = \frac{A}{(2\pi)^2} \sum_j \delta(E - E_j^{SS}(\vec{k}_\parallel)) \quad .$$

Der Raum der oberflächenadaptierten Volumenzustände (einschließlich der Oberflächenresonanzen) wird aufgespannt von einer Basis

$\{ \psi_{j,E,\vec{k}_\parallel} ; j = 1, \dots, G(E, \vec{k}_\parallel) \}$, die hinreichend weit im Kristallinneren

54) Die Oberflächenzustandsdichte darf nicht mit der Zustandsdichte der Oberflächenzustände verwechselt werden, die nur einen Teilaspekt der Oberflächeneffekte berücksichtigt! Man achte im folgenden sorgfältig auf die Attribute ($\hat{=}$ Indizes u. Argumente), durch welche die unter dem Oberbegriff "Zustandsdichte" ($\hat{=}$ Symbol "N") auftretenden Größen unterschieden werden.

als Linearkombination propagierender Blochwellen

$$(4.10) \quad \psi_{j,E,\vec{k}_{||}} = \sum_{\mu=1}^{2G} \alpha_{j\mu}(E, \vec{k}_{||}) \psi_{E,\vec{k}_{||}}^{(\mu)} \quad (j = 1, \dots, G)$$

dargestellt werden kann (vgl. Gl.(3.163)), wobei - wie in Abschnitt 4.1.1 ausgeführt wurde - die $G \times G$ -Matrix

$$(4.11) \quad \underline{\alpha}_+(E, \vec{k}_{||}) := (\alpha_{j\mu}(E, \vec{k}_{||}) ; 1 \leq j, \mu \leq G)$$

regulär, aber sonst beliebig zu wählen ist, während die Zeilenvektoren der Matrix

$$(4.12) \quad \underline{\alpha}_-(E, \vec{k}_{||}) := (\alpha_{j\mu}(E, \vec{k}_{||}) ; 1 \leq j \leq G, G+1 \leq \mu \leq 2G)$$

mit den Zeilenvektoren von $\underline{\alpha}_+(E, \vec{k}_{||})$ durch eine lineare Transformation $\underline{L}(E, \vec{k}_{||})$ verknüpft sind. Die Blochwellen $\psi_{E,\vec{k}_{||}}^{(\mu)}$ seien dadurch ausgezeichnet, daß sie den Stromoperator diagonalisieren (siehe (3.153), (3.154) und (A.8.1)); sie genügen also der Beziehung

$$(4.13) \quad I(b^{(\mu)}, b^{(\nu)}) = I_{\mu} \delta_{\mu\nu} = -N_{\mu} (d \cdot \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial E})^{-1} \delta_{\mu\nu},$$

wobei $N_{\mu} = N_{\mu}(E, \vec{k}_{||})$ das Normierungsintegral von $\psi_{E,\vec{k}_{||}}^{(\mu)}$ über eine Einheitszelle des Volumenbereiches bezeichnet (vgl. (3.39)-(3.45)).

Für die Überlappintegrale der Basiszustände $\psi_{j,E,\vec{k}_{||}}$ läßt sich mittels eines Grenzüberganges des Volumenbereiches $Z \times (z_B, z_n) \rightarrow Z \times (z_B, \infty)$ die Gleichung

$$(4.14) \quad \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{j,E',\vec{k}'_{||}}^* \psi_{j,E,\vec{k}_{||}} d^3r = \\ = \sum_{\mu,\nu=1}^{2G} \alpha_{j\mu}^*(E', \vec{k}'_{||}) \alpha_{j\nu}(E, \vec{k}_{||}) \int_{z_B}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^2} \psi_{E',\vec{k}'_{||}}^{(\mu)*} \psi_{E,\vec{k}_{||}}^{(\nu)} d^2r_{||} dz$$

herleiten. Beachtet man die Orthogonalitätsrelation

$$(4.15) \quad \int_{z_B}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^2} \psi_{E', \vec{k}_\parallel}^{(\mu)*} \psi_{E, \vec{k}_\parallel}^{(\nu)} d^2 r_\parallel dz = N_\mu \frac{(2\pi)^2}{A} \delta(\vec{k}_\parallel - \vec{k}_\parallel) \frac{\pi}{d} \delta(k_\perp^{(\mu)}(E', \vec{k}_\parallel) - k_\perp^{(\nu)}(E, \vec{k}_\parallel)) \delta_{\mu\nu}$$

(vgl./102, equ.(4.11)/; die δ -Funktionen sind als auf die Gitterpunkte von G_2^* bzw. $\frac{2\pi}{d} \mathbb{Z}$ konzentrierte Punktmäße zu interpretieren) und die Transformationsformel

$$(4.16) \quad \delta(k_\perp^{(\mu)}(E', \vec{k}_\parallel) - k_\perp^{(\nu)}(E, \vec{k}_\parallel)) = \left| \frac{\partial k_\perp^{(\mu)}}{\partial E} (E, \vec{k}_\parallel) \right|^{-1} \delta(E' - E) \quad ,$$

so wird klar, daß man die Blochwellen $\psi_{E, \vec{k}_\parallel}^{(\mu)}$ zweckmäßigerweise durch die Vorschrift

$$(4.17) \quad N_\mu(E, \vec{k}_\parallel) = \left| \frac{\partial k_\perp^{(\mu)}}{\partial E} (E, \vec{k}_\parallel) \right|$$

in der Weise normiert, daß sie alle denselben Strom tragen. Diese "Stromnormierung" ist bis auf solche $(E, \vec{k}_\parallel)$ -Werte, die auch schon bisher stets außer Betracht standen (vgl. Fußnote 49), immer möglich und verleiht den folgenden Überlegungen formale Einfachheit.

Als positiv definite hermitesche Matrix besitzt $\underline{1} + \underline{1}^{\dagger} \in$ orthonormale Eigenvektoren $\underline{x}_j \in \mathbb{C}^G$ mit positiven Eigenwerten λ_j ; wählt man $\lambda_j^{-1/2} \underline{x}_j$ als Zeilenvektoren der Matrix $\underline{\alpha}_+$, überzeugt man sich leicht davon, daß die $\in$ Zeilenvektoren der Matrix

$$(4.18) \quad \underline{\alpha} := (\underline{\alpha}_+, \underline{\alpha}_-) = (\underline{\alpha}_+, \underline{\alpha}_+^{\dagger})$$

orthonormal in $\mathbb{C}^{2G}$ sind, weswegen sich Gl.(4.14) reduziert zu

$$(4.19) \quad \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{j', E', \vec{k}_\parallel}^* \psi_{j, E, \vec{k}_\parallel} d^3 r = \frac{(2\pi)^3}{2V} \delta(\vec{k}_\parallel' - \vec{k}_\parallel) \delta(E' - E) \delta_{j'j}$$

(V = Volumen einer Einheitszelle im "Bulk").

Hieraus leitet sich für die $\vec{k}_\parallel$ -aufgelöste lokale Zustandsdichte die Darstellung

$$(4.20) \quad N^b(E, \vec{k}_\parallel, \vec{r}) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \sum_{j=1}^G |\psi_{j, E, \vec{k}_\parallel}(\vec{r})|^2$$

ab; um diese jedoch weiter auswerten zu können, müssen wir uns noch eingehender mit den Matrizen $\underline{\alpha}_+$ und $\underline{\alpha}_-$ befassen.

Da das Stromüberlappintegral (3.37) der gebundenen Zustände $\psi_{j,E,\vec{k}_n}$ und $\psi_{j',E,\vec{k}_n}$ für $z \rightarrow -\infty$ verschwindet, ist dies aufgrund der Stromerhaltung (siehe (3.29)) auch tief im Volumenbereich der Fall, woraus man wegen (4.13) und (4.17) schließen kann:

$$(4.21) \quad \sum_{\mu=1}^G \alpha_{j'\mu}^*(E, \vec{k}_n) \alpha_{j\mu}(E, \vec{k}_n) = \sum_{\mu=G+1}^{2G} \alpha_{j'\mu}^*(E, \vec{k}_n) \alpha_{j\mu}(E, \vec{k}_n)$$

Andererseits sind die Zeilenvektoren von $\underline{\alpha}$ per constructionem orthonormal; daher sind die Matrizen $\sqrt{2}\underline{\alpha}_+$ und $\sqrt{2}\underline{\alpha}_-$ beide notwendigerweise unitär. Mithin ist auch die $G \times G$ -Matrix

$$(4.22) \quad \underline{A}(E, \vec{k}_n) := 2\underline{\alpha}_+(E, \vec{k}_n)^\dagger \underline{\alpha}_-(E, \vec{k}_n)$$

unitär, welche es gestattet, die lokale Zustandsdichte hinreichend weit im Kristallinneren allein durch die propagierenden Blochwellen auszudrücken:

$$(4.23) \quad N^b(E, \vec{k}_n, \vec{r}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \left(\sum_{\mu=1}^{2G} |\psi_{E,\vec{k}_n}^{(\mu)}(\vec{r})|^2 + 2 \operatorname{Re} \sum_{\mu,\nu=1}^G \psi_{E,\vec{k}_n}^{(\mu)}(\vec{r})^* A_{\mu\nu} \psi_{E,\vec{k}_n}^{(\nu+\mu)}(\vec{r}) \right)$$

Man beachte, daß die Matrix $\underline{A}$ invariant bleibt bei einer unitären Transformation der Basis $\{\psi_{j,E,\vec{k}_n} | j = 1, \dots, G\}$; speziell die durch $\sqrt{2}\underline{\alpha}_+^\dagger(E, \vec{k}_n)$ vermittelte Transformation führt zu folgender asymptotischer Form der Basiszustände ⁵⁵⁾

$$(4.24) \quad \tilde{\psi}_{j,E,\vec{k}_n} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{E,\vec{k}_n}^{(j)} + \sum_{\mu=1}^G A_{j\mu}(E, \vec{k}_n) \psi_{E,\vec{k}_n}^{(G+\mu)} \right) \quad (j=1, \dots, G),$$

sodaß die Matrixelemente $A_{j\mu}$ physikalisch als Reflexionskoeffizienten der im Oberflächenbereich reflektierten Blochwelle $\psi_{E,\vec{k}_n}^{(j)}$ zu interpretieren sind.

55) Die der physikalischen Intuition folgenden Ansätze anderer Autoren (/116/; /64/; /102/) für die Form elektronischer Halbraumzustände im Kristallinneren sind damit streng gerechtfertigt.

Wird die lokale Zustandsdichte $N^b(E, \vec{k}_\parallel, \vec{r})$ über eine genügend lange Säule von tief im Kristallinneren gelegenen Volumeneinheitellen (= "eindimensionaler Makroblock"; siehe vor Gl.(3.135)) integriert, verschwindet der Beitrag des durch Interferenz von Blochwellen entgegengesetzter Stromrichtung entstehenden Termes in Gl.(4.23)⁵⁶⁾ und man erhält (mit $l = 2^n$)

$$(4.25) \quad \int_{z_0}^{z_0+l} \int_Z N^b(E, \vec{k}_\parallel, \vec{r}) d^2 r_\parallel dz = l \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\mu=1}^{2G} \left| \frac{\partial k_\perp^{(\mu)}}{\partial E}(E, \vec{k}_\parallel) \right|.$$

Beachtet man, daß das auf der Äquienergiefläche im $\vec{k}$ -Raum

$$(4.26) \quad \Sigma(E) = \left\{ \vec{k} = (\vec{k}_\parallel, k_\perp^{(\mu)}(E, \vec{k}_\parallel)) \mid \vec{k}_\parallel \in \overline{BZ}_1; \mu=1, \dots, 2G(E, \vec{k}_\parallel) \right\} = \\ = \bigcup_{j \in \mathbb{N}} \left\{ \vec{k} \mid \varepsilon_j(\vec{k}) = E \right\}$$

konzentrierte Maß

$$(4.27) \quad d\Sigma_E = \sum_{j \in \mathbb{N}} \delta(E - \varepsilon_j(\vec{k})) d^3 k = \sum_{j \in \mathbb{N}} \left| \frac{\partial \varepsilon_j}{\partial \vec{k}} \right|^{-1} d\sigma_j(\vec{k})$$

($d\sigma_j$ bezeichne das Oberflächenmaß auf $\{\varepsilon_j(\vec{k}) = E\}$)
in der Parametrisierung $\vec{k}_\parallel \mapsto k_\perp^{(\mu)}(E, \vec{k}_\parallel)$ die Gestalt

$$(4.28) \quad d\Sigma_E = \sum_{\mu=1}^{2G} \left| \frac{\partial k_\perp^{(\mu)}}{\partial E} \right| d^2 k_\parallel$$

annimmt, erkennt man, daß die auf die Säule $Z \times (z_0, z_0+l)$ bezogene (totale) Zustandsdichte proportional ist zur Zahl l der zugrunde liegenden Volumeneinzelschichten und zur Zustandsdichte des dreidimensional unendlich ausgedehnten Kristalls

$$(4.29) \quad N^{vol}(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\Sigma_E$$

(bezogen auf dessen Einheitszelle !), wie es die physikalische Anschauung

56) Dieser Interferenzterm macht sich in der elektronischen Ladungsdichte in Form von Friedel-Oszillationen (/4,§3.1/) bemerkbar.

erwarten läßt:

$$(4.30) \quad \int_{BZ_1} \int_{z_0}^{z_0+ld} \iint_Z N^b(E, \vec{k}_\parallel, \vec{r}) \, d^2 r_\parallel \, dz \, d^2 k_\parallel = 1 \cdot N^{vol}(E)$$

4.2.2 Die Definition der Oberflächenzustandsdichte und ihr Bezug zur Ladungsneutralität

Aufgrund der Verschiedenheit der Normierungsvorschriften für die Oberflächen- und Volumenzustände lassen sich deren Zustandsdichten nicht unmittelbar vergleichen. Bezieht man beide auf eine Säule $Z \times (-\infty, z_n)$ und läßt $z_n \rightarrow \infty$ streben, so ist die Zustandsdichte der Volumenzustände proportional zum Volumen $A \cdot z_n$ und divergiert mit $l = 2^n$, während die Zustandsdichte der Oberflächenzustände proportional zur Fläche A ist und endlich bleibt. Daher ist es zweckmäßig, von der "integrierten Zustandsdichte" (/4,§3.1/)

$$(4.31) \quad N_{int}^b(E, \vec{k}_\parallel, z_0, l) := \int_{-\infty}^{z_0+ld} \iint_Z N^b(E, \vec{k}_\parallel, \vec{r}) \, d^2 r_\parallel \, dz$$

den durch Gl.(4.25) gegebenen Term abzuspalten, bevor man zur Grenze $l \rightarrow \infty$ übergeht. Dies führt zunächst auf den Begriff der ($\vec{k}_\parallel$ -aufgelösten) "integrierten Oberflächenzustandsdichte" der oberflächenadaptierten Volumenzustände

$$(4.32) \quad N_{int}^{sb}(E, \vec{k}_\parallel, z_0, l) := N_{int}^b(E, \vec{k}_\parallel, z_0, l) - 1 \cdot \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\mu=1}^{2G} \left| \frac{\partial k_\mu^\omega}{\partial E}(E, \vec{k}_\parallel) \right|$$

und schließlich zu folgender Definition der ($\vec{k}_\parallel$ -aufgelösten) Oberflächenzustandsdichte:

$$(4.33) \quad N^{sur}(E, \vec{k}_\parallel, z_0) := \lim_{l \rightarrow \infty} N_{int}^{sb}(E, \vec{k}_\parallel, z_0, l) + N^{ss}(E, \vec{k}_\parallel)$$

Die Referenzebene $z = z_0$ ist hierbei im Volumenbereich gelegen; zweckmäßigerweise wird man sie in der Nähe des Übergangs zum Oberflächenbereich wählen ($z \approx z_B$, vgl. Abschnitt 3.3.1). Die Oberflächenzustandsdichte beschreibt dann die Änderung der Zustandsdichte des dreidimensional unendlich ausgedehnten Kristalls, die dadurch eintritt, daß dieser längs der

Ebene $z = z_0$ aufgeschnitten wird und seine "linke" Hälfte durch den Oberflächen- und Vakuumbereich ersetzt wird. Außerdem dient die Ebene $z = z_0$ als Bezugsfläche für den bei der konkreten Berechnung der Oberflächenzustandsdichte notwendigen Abgleich der Phasen der propagierenden Blochwellen $\psi_{E, \vec{k}_\parallel}^{(\mu)}$ (siehe S.140).

Die bei der Festlegung von z_0 bestehende Willkür drückt sich darin aus, daß einer Änderung von z_0 um den Betrag Δz_0 das Hinzutreten eines additiven Termes in Def.(4.33) entspricht, der gerade durch die mit dem Faktor $\Delta z_0/d$ multiplizierte Volumenzustandsdichte gegeben ist (vgl. /4,p.115/). Diese Eigenschaft erweist sich als nützlich bei der Formulierung der Forderung nach Ladungsneutralität. Hierunter ist zu verstehen, daß die in einer Säule $Z \times (-\infty, z_n)$ enthaltene elektronische Ladung (einschließlich der von der Existenz der Oberflächenzustände und der von der Anpassung der Volumenzustände an die Oberflächenrandbedingungen herrührenden Ladungsanteile) und die darin enthaltene Ladung der Ionenrümpfe (einschließlich etwaiger Defizit- oder Überschußladungen im Oberflächenbereich) sich für $z_n \rightarrow \infty$ gerade kompensieren müssen. Aus dieser Forderung können wir nun auf folgende Weise eine Bedingung an die Oberflächenzustandsdichte ableiten:

Die Ladung der Oberflächenzustände in der Säule $Z \times \mathbb{R}$ beträgt

$$(4.34) \quad Q_{el}^{ss} = 2e \int_{-\infty}^{E_F} \int_{BZ_1} N^{ss}(E, \vec{k}_\parallel) d^2 k_\parallel dE$$

(E_F = Fermienergie)

und die Ladung der Volumenzustände in der Säule $Z \times (-\infty, z_n)$ ist nach Gl.(4.29)-(4.32) gegeben durch

$$(4.35) \quad Q_{el}^b(z_n) = 2e \left(\int_{-\infty}^{E_F} \int_{BZ_1} N_{int}^{sb}(E, \vec{k}_\parallel, z_0, 1) d^2 k_\parallel dE + 1 \cdot \int_{-\infty}^{E_F} N^{vol}(E) dE \right)$$

Von der über die Querschnittsfläche Z integrierten ionischen Ladungsdichte $\varrho_{ion}(z)$ wollen wir annehmen, daß sie für $z \gg z_0$ eine Zerlegung

$$(4.36) \quad \varrho_{ion}(z) = \bar{\varrho}_{ion} + \varrho_{ion}^{osc}(z) + \varrho_{ion}^{ev}(z)$$

zuläßt in der Weise, daß $\bar{\varrho}_{ion}$ den über ein Intervall $(\hat{z}, \hat{z}+d)$ gemittelten Wert von $\varrho_{ion}(z)$ im Limes $\hat{z} \rightarrow \infty$ darstellt, der Mittelwert von $\varrho_{ion}^{osc}(z)$

über jedes Intervall der Länge d verschwindet und das Integral von $\rho_{\text{ion}}^{\text{ev}}(z)$ über jedes Intervall $(\hat{z}, \infty)$ endlich bleibt. Aus der Ladungsneutralität für den unendlich ausgedehnten Kristall ist dann auf

$$(4.37) \quad \bar{\rho}_{\text{ion}} = \frac{2e}{d} \cdot \int_{-\infty}^{E_F} N^{\text{vol}}(E) dE$$

zu schließen. Damit die Differenz zwischen der im Gebiet $Z \times (-\infty, z_n)$ enthaltenen ionischen Ladung

$$(4.38) \quad Q_{\text{ion}}(z_n) = \int_{-\infty}^{z_0} \rho_{\text{ion}}(z) dz + l \cdot \bar{\rho}_{\text{ion}} \cdot d + \int_{z_0}^{z_0+ld} \rho_{\text{ion}}^{\text{ev}}(z) dz$$

und der elektronischen Ladung $Q_{\text{el}}^b + Q_{\text{el}}^{\text{ss}}$ im Limes $z_n \rightarrow \infty$ (d.h. $l \rightarrow \infty$) verschwindet, muß also gelten:

$$(4.39) \quad 2e \int_{-\infty}^{E_F} \int_{\text{BZ}_1} N^{\text{sur}}(E, \vec{k}_n, z_0) d^2 k_n dE = \int_{-\infty}^{z_0} \rho_{\text{ion}}(z) dz + \int_{z_0}^{\infty} \rho_{\text{ion}}^{\text{ev}}(z) dz$$

Abgesehen von einfachen Modellfällen (wie z.B. dem Jellium-Modell mit unendlich hoher Potentialbarriere im Außenraum (/4,p.159/)) darf man nicht erwarten, daß die in dieser Weise formulierte Neutralitätsbedingung für jede Lage der Referenzebene $z = z_0$ befriedigt werden kann. Aus physikalischer Sicht angemessener ist vielmehr, die abgeschwächte Forderung nach "Ladungsneutralität im mikroskopischen Mittel" zu erheben, worunter zu verstehen ist, daß Gl.(4.39) nur für die bezüglich z_0 über eine oder einige Schichtdicken gemittelten Größen gelten soll (vgl./116, equ.(2.27)).

Während bei einer selbstkonsistenten Bestimmung sowohl der elektronischen als auch der ionischen Ladungsdichte die Ladungsneutralität als notwendige Bedingung von selbst erfüllt wird, kann sie im Falle nichtselbstkonsistenter Rechnungen dazu dienen, beide Ladungsdichten gegeneinander abzugleichen.

4.3 Zur konkreten Berechnung der Oberflächenzustandsdichte

4.3.1 Die integrierte Oberflächenzustandsdichte ⁵⁷⁾

Um für die integrierte Oberflächenzustandsdichte $N_{\text{int}}^{\text{sb}}$ einen expliziten Ausdruck zu erhalten, gehen wir aus von der aus der Schrödingergleichung und der Kontinuitätsgleichung zu folgender Beziehung

$$(4.40) \quad \int_{-\infty}^{z_n} \int_Z |\psi_{j,E,\vec{k}_\parallel}|^2 d^2 r_\parallel dz = \\ = \int_{Z \times \{z_n\}} (\partial_E \psi_{j,E,\vec{k}_\parallel}^* \cdot \partial_Z \psi_{j,E,\vec{k}_\parallel} - \partial_E \partial_Z \psi_{j,E,\vec{k}_\parallel}^* \cdot \psi_{j,E,\vec{k}_\parallel}) d^2 r_\parallel$$

$$(z_n = z_0 + 1 \cdot d, 1 = 2^n).$$

Setzt man hier für $\psi_{j,E,\vec{k}_\parallel}$ die Darstellung (4.10) ein und beachtet die in Abschnitt 4.2.1 abgeleiteten Ergebnisse (insbesondere Stromnormierung und Unitarität der Matrizen $\sqrt{2}\underline{\alpha}_+$, $\sqrt{2}\underline{\alpha}_-$ und $\underline{A}$), so ergibt sich nach einigen Zwischenrechnungen

$$(4.41) \quad \frac{(2\pi)^3}{V} N_{\text{int}}^b(E, \vec{k}_\parallel, z_0, 1) = \sum_{\mu=1}^{2G} D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z_n) + \\ + 2 \operatorname{Re} \left\{ \sum_{\mu, \nu=1}^G A_{\mu\nu}(E, \vec{k}_\parallel) D_{\mu, G+\nu}(E, \vec{k}_\parallel, z_n) \right\} - \frac{i}{d} \operatorname{sp}(\underline{A}(E, \vec{k}_\parallel)^\dagger \partial_E \underline{A}(E, \vec{k}_\parallel))$$

mit

$$(4.42) \quad D_{\mu\nu}(E, \vec{k}_\parallel, z) := \int_{Z \times \{z\}} (\partial_E \psi_{E,\vec{k}_\parallel}^{(\mu)*} \cdot \partial_Z \psi_{E,\vec{k}_\parallel}^{(\nu)} - \partial_E \partial_Z \psi_{E,\vec{k}_\parallel}^{(\mu)*} \cdot \psi_{E,\vec{k}_\parallel}^{(\nu)}) d^2 r_\parallel$$

Da die Blochwellen $\psi^{(\mu)}$ der Randbedingung (2.218) genügen, kann man $D_{\mu\nu}(E, \vec{k}_\parallel, z_n)$ auf die Referenzebene $z = z_0$ "rückrechnen" gemäß

$$(4.43) \quad D_{\mu\nu}(E, \vec{k}_\parallel, z_n) = D_{\mu\nu}(E, \vec{k}_\parallel, z_0) \cdot e^{i(k_\perp^{(\nu)} - k_\perp^{(\mu)})d} + \delta_{\mu\nu} \cdot 1 \cdot \left| \frac{\partial k_\perp^{(\mu)}}{\partial E} \right|$$

57) Die im folgenden angestellten Überlegungen verallgemeinern, präzisieren und korrigieren zum Teil Ergebnisse von Appelbaum & Blount (/116/).

und auf diese Weise in der Tat den von der Volumenzustandsdichte herrührenden Term (4.25) abseparieren. Aufgrund der Unitarität der Matrix $\underline{A}(E, \vec{k}_n)$ gilt ferner

$$(4.44) \quad \text{sp}(\underline{A}(E, \vec{k}_n)^{\dagger} \partial_E \underline{A}(E, \vec{k}_n)) = i \cdot \frac{\partial}{\partial E} \arg(\det(\underline{A}(E, \vec{k}_n))) \quad ,$$

sodaß wir schließlich die integrierte Oberflächenzustandsdichte als Summe zweier Beiträge

$$(4.45) \quad N_{\text{int}}^{\text{sb}}(E, \vec{k}_n, z_0, 1) = N_{\text{int}}^{(1)}(E, \vec{k}_n, z_0) + N_{\text{int}}^{(2)}(E, \vec{k}_n, z_0, 1)$$

schreiben können mit

$$(4.46) \quad N_{\text{int}}^{(1)}(E, \vec{k}_n, z_0) := \frac{A}{(2\pi)^2} \left\{ \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial E} \arg(\det(\underline{A}(E, \vec{k}_n))) + \frac{d}{2\pi} \sum_{\mu=1}^{2G} D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_n, z_0) \right\}$$

und

$$(4.47) \quad N_{\text{int}}^{(2)}(E, \vec{k}_n, z_0, 1) := \frac{V}{(2\pi)^3} 2 \operatorname{Re} \left\{ \sum_{\mu, \nu=1}^G A_{\mu\nu}(E, \vec{k}_n) D_{\mu, G+\nu}(E, \vec{k}_n, z_n) \right\}$$

Um die von der Integrationslänge z_n unabhängige Größe $N_{\text{int}}^{(1)}$ interpretieren zu können, beschränken wir uns zunächst auf den Fall, daß im Volumenbereich nur zwei propagierende Blochwellen mit entgegengesetzter Stromrichtung existieren ($G = 1$). Die unitäre Matrix $\underline{A}(E, \vec{k}_n)$ besteht dann aus einer einzigen Zahl $\exp(i2\gamma(E, \vec{k}_n))$ auf der komplexen Einheitskreislinie, wobei $\gamma(E, \vec{k}_n)$ gerade die Streuphase zwischen beiden Blochwellen darstellt (siehe (4.24)). Wir erhalten somit das bekannte Resultat, daß der kontinuierliche Beitrag zur Oberflächenzustandsdichte durch die Energieableitung der Streuphase gegeben ist, sofern die Phasen der Blochwellen so geeicht sind, daß $D_{11} + D_{22}$ bei $z = z_0$ verschwindet (/116, equ.(2.29)/; /4, §3.1/); ist die Eichung beliebig gewählt, kompensiert der zweite Summand in Gl.(4.46) gerade die hieraus erwachsende Änderung der Energieabhängigkeit der Streuphase, sodaß also $N_{\text{int}}^{(1)}$ eine gegen Phasentransformationen invariante Größe ist.

Der Ausdruck (4.46) leistet nun die Verallgemeinerung dieses Sachverhaltes im Fall $G > 1$. Unterwerfen wir die Basisfunktionen $\psi_{E, \vec{k}_\parallel}^{(\mu)}$ nämlich der Transformation

$$(4.48) \quad \hat{\psi}_{E, \vec{k}_\parallel}^{(\mu)} = e^{i\beta^{(\mu)}(E, \vec{k}_\parallel)} \psi_{E, \vec{k}_\parallel}^{(\mu)}$$

mit (hinreichend regulären) reellen Phasenfunktionen $\beta^{(\mu)}(E, \vec{k}_\parallel)$, so wird hierdurch für die Reflexionskoeffizienten $A_{\mu\nu}(E, \vec{k}_\parallel)$ das Transformationsverhalten

$$(4.49) \quad \hat{\underline{A}}(E, \vec{k}_\parallel) = \underline{U}_+(E, \vec{k}_\parallel) \underline{A}(E, \vec{k}_\parallel) \underline{U}_-(E, \vec{k}_\parallel)^+$$

mit

$$(4.50) \quad \underline{U}_+ := \text{diag}(e^{i\beta^{(1)}}, \dots, e^{i\beta^{(G)}}) ; \underline{U}_- := \text{diag}(e^{i\beta^{(G+1)}}, \dots, e^{i\beta^{(2G)}})$$

induziert, woraus man weiter schließen kann:

$$(4.51) \quad \frac{\partial}{\partial E} \arg(\det(\hat{\underline{A}})) = \frac{\partial}{\partial E} \arg(\det(\underline{A})) + \sum_{\nu=1}^G \left(\frac{\partial \beta^{(\nu)}}{\partial E} - \frac{\partial \beta^{(G+\nu)}}{\partial E} \right) .$$

Andererseits ist durch die Stromnormierung (4.17) gewährleistet, daß sich die Größen $D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z)$ wie

$$(4.52) \quad \hat{D}_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z) = D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z) - \frac{1}{d} \text{sgn}(I_\mu) \frac{\partial \beta^{(\mu)}}{\partial E}(E, \vec{k}_\parallel)$$

transformieren; folglich bleibt $N_{\text{int}}^{(1)}$ invariant unter der Phasentransformation (4.48).

Durch die Differentiation von Gl.(3.37) nach der Energie läßt sich zeigen, daß aufgrund der Stromnormierung $D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z)$ nur reelle Werte annimmt. Man kann daher die Phasen $\beta^{(\mu)}$ so wählen, daß sie der Beziehung

$$(4.53) \quad \frac{\partial \beta^{(\mu)}}{\partial E}(E, \vec{k}_\parallel) = d \cdot \text{sgn}(I_\mu) \cdot D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z_0)$$

genügen mit der Folge, daß $\hat{D}_{\mu\mu}(E, \vec{k}_\parallel, z_0)$ verschwindet und $N_{\text{int}}^{(1)}$ allein durch die Energieableitung von $\arg(\det(\underline{A}))$ zu bestimmen ist.

Eine ähnliche Argumentation wie oben zeigt, daß auch die Produkte $A_{\mu\nu} D_{\mu, \mathbb{G}+\nu}$ einen von der Phasenwahl unabhängigen Wert haben, weswegen $N_{\text{int}}^{(2)}$ ebenfalls eine phaseninvariante Größe darstellt. Bezüglich der Abhängigkeit von der Integrationslänge z_n zeigt diese ein oszillierendes Verhalten (siehe Gl.(4.43)). Da sich $D_{\mu\nu}(z_0)$ für $\mu \neq \nu$ schreiben läßt als

$$(4.54) \quad D_{\mu\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z_0) = (e^{i(k_{\perp}^{(\nu)} - k_{\perp}^{(\mu)})d} - 1)^{-1} \int_{z_0}^{z_0+d} \int_Z \gamma_{E, \vec{k}_{\parallel}}^{(\mu)*} \psi_{E, \vec{k}_{\parallel}}^{(\nu)} d^2 r_{\parallel} dz,$$

werden die Amplituden der Oszillationen in dem Maße stärker, wie die Energie E in die Nähe einer der Energien $E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$ rückt, bei denen zwei Zweige $k_{\perp}^{(\mu)}(E, \vec{k}_{\parallel})$ und $k_{\perp}^{(\mathbb{G}+\nu)}(E, \vec{k}_{\parallel})$ der (eindimensionalen) Bandstruktur $k_{\perp} \mapsto (\varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}))_{j \in \mathbb{N}}$ miteinander verbunden sind:

$$(4.55) \quad k_{\perp}^{(\mathbb{G}+\nu)}(E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel}), \vec{k}_{\parallel}) = k_{\perp}^{(\mu)}(E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel}), \vec{k}_{\parallel}) := k_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$$

Zu berücksichtigen sind hier keine Schnittpunkte von Energiebändern verschiedener Symmetrie, weil in diesem Falle das Überlappintegral in Gl.(4.54) verschwindet; daher handelt es sich bei den Punkten $(k_{\nu}^{\mu}, E_{\nu}^{\mu})$ im Regelfall ⁴⁰⁾ um die lokalen Extrema der (eindimensionalen) Bandstruktur $k_{\perp} \mapsto (\varepsilon_j(\vec{k}_{\parallel}, k_{\perp}))_{j \in \mathbb{N}}$.

Bei der zur Bestimmung der elektronischen Ladung $Q_{\text{el}}^b(z_n)$ durchzuführenden Integration von $N_{\text{int}}^{(2)}$ über den Phasenraum erhält man somit einerseits einen oszillierenden Term proportional zu z_n^{-1} (Friedel-Oszillationen), der also im Limes $z_n \rightarrow \infty$ zu Null geht; andererseits liefern die Phasenraumbereiche mit $E \approx E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$ einen Beitrag, der für $z_n \rightarrow \infty$ einem endlichen Wert zustrebt und im folgenden näher betrachtet wird.

4.3.2 Der Grenzübergang zum Halbraum

Für die Diskussion des asymptotischen Verhaltens der integrierten Oberflächenzustandsdichte in der Nähe einer der kritischen Energien $E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$ erweist es sich als zweckmäßig, die (bezüglich der Variablen E in einer einseitigen Umgebung von $E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$ definierte) Differenzfunktion

$$(4.56) \quad \kappa_{\nu}^{\mu}(E, \vec{k}_{\parallel}) := k_{\perp}^{(\sigma+\nu)}(E, \vec{k}_{\parallel}) - k_{\perp}^{(\mu)}(E, \vec{k}_{\parallel})$$

einzuführen und die Größen $D_{\mu, \sigma+\nu}$ zu faktorisieren gemäß

$$(4.57) \quad D_{\mu, \sigma+\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z) = \frac{\exp(i\kappa_{\nu}^{\mu}(E, \vec{k}_{\parallel})z)}{2i \cdot \sin(\kappa_{\nu}^{\mu}(E, \vec{k}_{\parallel})d/2)} \Pi_{\mu\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z) \quad ,$$

wobei

$$(4.58) \quad \Pi_{\mu\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z) := \int_z^{z+d} \int_Z \psi_{E, \vec{k}_{\parallel}}^{(\mu)*} \psi_{E, \vec{k}_{\parallel}}^{(\sigma+\nu)} d^2 r_{\parallel} d\zeta \quad e^{-i\kappa_{\nu}^{\mu}(E, \vec{k}_{\parallel})(z+d/2)}$$

eine bezüglich z periodische Funktion ist mit Periode d . Unter der Annahme, daß die beiden Zweige $k_{\perp}^{(\mu)}(E, \vec{k}_{\parallel})$ und $k_{\perp}^{(\sigma+\nu)}(E, \vec{k}_{\parallel})$ beim Extremum $E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$ glatt miteinander verheftet sind und ein parabolisches (eindimensionales) Energieband bilden, gilt in einer einseitigen Umgebung von $E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$

$$(4.59) \quad \kappa_{\nu}^{\mu}(E, \vec{k}_{\parallel}) = 2 \frac{\partial \kappa_{\nu}^{\mu}}{\partial E}(E, \vec{k}_{\parallel}) \cdot (E - E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})) (1 + O((E - E_{\nu}^{\mu})^{1/2})) \quad ,$$

woraus man schließen kann (58):

$$(4.60) \quad \lim_{E \rightarrow E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})} \left| \frac{\partial \kappa_{\nu}^{\mu}}{\partial E} \right|^{-1} \cdot \left| \frac{\partial k_{\perp}^{(\mu)}}{\partial E} \right|^{1/2} \cdot \left| \frac{\partial k_{\perp}^{(\sigma+\nu)}}{\partial E} \right|^{1/2} = \frac{1}{2}$$

("+" bei Energieminimum, "-" bei Energiemaximum)

Aufgrund der Stromnormierung (4.17) existiert dann

$$(4.61) \quad C_{\mu\nu}(\vec{k}_{\parallel}, z) := \lim_{E \rightarrow E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})} 2 \cdot \left| \frac{\partial \kappa_{\nu}^{\mu}}{\partial E} \right|^{-1} \Pi_{\mu\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z) \quad ,$$

sodaß $\Pi_{\mu\nu}$ eine Darstellung der Form

$$(4.62) \quad \Pi_{\mu\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z) = \left(\frac{1}{2} C_{\mu\nu}(\vec{k}_{\parallel}, z) + \Delta_{\mu\nu}(E, \vec{k}_{\parallel}, z) \right) \left| \frac{\partial \kappa_{\nu}^{\mu}}{\partial E} \right|$$

besitzt, wobei $\Delta_{\mu\nu}$ für $E \rightarrow E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{\parallel})$ gegen Null strebt.

58) Die $\vec{k}_{\parallel}$ -Abhängigkeit wird im Hinblick auf eine kompaktere Schreibweise im folgenden oftmals unterdrückt.

Als nächstes ist festzustellen, daß die Größe $C_{\mu\nu}$ von z unabhängig ist. Dies beruht auf der Identität

$$(4.63) \quad \begin{aligned} & \Pi_{\mu\nu}(E, \vec{k}_y, z) - \Pi_{\mu\nu}(E, \vec{k}_y, \hat{z}) = \\ & = \int_0^d e^{i\kappa_\nu^\mu(\xi - d/2)} (U_{\mu\nu}(z + \xi) - U_{\mu\nu}(\hat{z} + \xi)) d\xi \quad ; \end{aligned}$$

hierbei bezeichnet $U_{\mu\nu}(z)$ das Überlappintegral

$$(4.64) \quad U_{\mu\nu}(z) := \int_Z u^{(\mu)}(\vec{r}_\mu, z)^* u^{(\nu)}(\vec{r}_\nu, z) d^2 r_\mu$$

der gitterperiodischen Anteile $u^{(\mu)}(\vec{r}) := \exp(-i\vec{k}^{(\mu)} \cdot \vec{r}) \psi^{(\mu)}(\vec{r})$ der propagierenden Blochwellen. Da $U_{\mu\nu}$ eine periodische Funktion von z ist (mit Periode d), stimmen die über das Intervall $[0, d]$ gemittelten Werte von $U_{\mu\nu}(z + \cdot)$ und $U_{\mu\nu}(\hat{z} + \cdot)$ überein, sodaß für $E \rightarrow E_\nu^{\mu \pm} 0$ (d.h. $\kappa_\nu^\mu \rightarrow 0$) die rechte Seite von Gl.(4.63) verschwindet. Mithin ist der Grenzwert (4.61) unabhängig von z .

Die bisherigen Überlegungen zusammenfassend erhalten wir

$$(4.65) \quad \begin{aligned} & \text{Re}(A_{\mu\nu}(E, \vec{k}_y) \cdot D_{\mu, \sigma+\nu}(E, \vec{k}_y, z_0)) = \\ & = \frac{\sin(\kappa_\nu^\mu(z_0 + d/2))}{2 \cdot \sin(\kappa_\nu^\mu d/2)} \text{Re}(A_{\mu\nu}(\frac{1}{2} C_{\mu\nu} + \Delta_{\mu\nu}(z_0))) \left| \frac{\partial \kappa_\nu^\mu}{\partial E} \right| + \\ & + \frac{\cos(\kappa_\nu^\mu(z_0 + d/2))}{2 \cdot \sin(\kappa_\nu^\mu d/2)} \text{Im}(A_{\mu\nu}(\frac{1}{2} C_{\mu\nu} + \Delta_{\mu\nu}(z_0))) \left| \frac{\partial \kappa_\nu^\mu}{\partial E} \right| \end{aligned}$$

Nun läßt sich der Grenzübergang zum Halbraum ($l \rightarrow \infty$) vollziehen. Der erste Summand verhält sich bezüglich einer Integration über E wie eine Deltafunktion:

$$(4.66) \quad \frac{\sin(\kappa_\nu^\mu(E, \vec{k}_y)(z_0 + d/2))}{2 \cdot \sin(\kappa_\nu^\mu(E, \vec{k}_y)d/2)} \left| \frac{\partial \kappa_\nu^\mu}{\partial E} \right| \xrightarrow{(l \rightarrow \infty)} \frac{\pi}{2d} \delta(E - E_\nu^\mu(\vec{k}_y))$$

Der zweite Summand hat in einer einseitigen Umgebung von $E_\nu^\mu(\vec{k}_y)$ für jedes l näherungsweise die Form

$$(4.67) \quad (2d \cdot (E - E_\nu^\mu(\vec{k}_y)))^{-1} \cdot \text{Im}(1/2 A_{\mu\nu}(E, \vec{k}_y) \cdot C_{\mu\nu}(\vec{k}_y))$$

Damit dieser Ausdruck eine Interpretation als Dichte im Phasenraum gestattet, dürfen bei einer Integration über die Energie keine Divergenzen auftreten (vgl. Abschnitt 4.2.2). Daher muß der Zähler $\text{Im}(A_{\mu\nu}C_{\mu\nu})$ für $E \rightarrow E_{\nu}^{\mu}$ hinreichend schnell gegen Null gehen; orientiert man sich am Modell freier Elektronen (/4,§3.1/), erscheint die Annahme plausibel, daß diese Größe ein Verhalten wie $|E - E_{\nu}^{\mu}|^{\lambda}$ (mit einem positiven Exponenten λ) zeigt. Dies vorausgesetzt zeigt sich, daß bei einer Phasenraumintegration der Beitrag des zweiten Summanden in Gl.(4.65) zur Zustandsdichte im Limes $l \rightarrow \infty$ verschwindet.

Somit ergibt sich schließlich für die Oberflächenzustandsdichte (4.33) folgende explizite Darstellung:

$$(4.68) \quad N^{\text{sur}}(E, \vec{k}_n, z_0) = \frac{A}{(2\pi)^2} \left\{ \sum_j \delta(E - E_j^{\text{ss}}(\vec{k}_n)) + \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial E} \arg(\det(\Delta(E, \vec{k}_n))) + \frac{d}{2\pi} \sum_{\mu=1}^{2\sigma} D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_n, z_0) + \frac{1}{4} \sum_{\mu, \nu=1}^{\sigma} \text{Re}(A_{\mu\nu}(E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n), \vec{k}_n) \cdot C_{\mu\nu}(\vec{k}_n)) \delta(E - E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)) \right\}$$

($C_{\mu\nu}(\vec{k}_n)$ ist gleich Null zu setzen, wenn $k_{\perp}^{(\sigma+\nu)}(E, \vec{k}_n)$ und $k_{\perp}^{(\mu)}(E, \vec{k}_n)$ sich nicht schneiden oder Zweige von Bändern verschiedener Symmetrie sind; $A_{\mu\nu}(E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n), \vec{k}_n)$ ist als rechtsseitiger bzw. linksseitiger Limes $E \rightarrow E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n), \pm 0$ zu verstehen.)

Das Auftreten des von $N_{\text{int}}^{(2)}$ herrührenden letzten Termes erklärt sich folgendermaßen: Gerade bei den Energien $E = E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)$ ändert sich die Dimension $p(E, \vec{k}_n)$ des von den propagierenden Blochwellen aufgespannten Raumes und damit auch die Zahl $\sigma(E, \vec{k}_n)$ der linear unabhängigen oberflächenadaptierten Volumenzustände. So erhöht sich beispielsweise bei einem Energieminimum (ohne Entartung!) $p(E, \vec{k}_n)$ von $2\sigma_0$ für $E < E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)$ über $2\sigma_0 + 1$ bei $E = E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)$ auf $2\sigma_0 + 2$ für $E > E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)$, während $\sigma(E, \vec{k}_n)$ bei $E = E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)$ von σ_0 auf $\sigma_0 + 1$ springt. Der Wert von $\sigma(E, \vec{k}_n)$ bei $E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_n)$ selbst hängt davon ab, wieviele (linear unabhängige) Linearkombinationen der $2\sigma_0 + 1$ Blochwellen sich an die Randbedingungen des Oberflächen- bzw. Vakuumbereiches anpassen lassen, eine Frage, die bisher stets ausgeklammert war (vgl. Fußnote 49) und deren Beantwortung nun innerhalb des entwickelten Formalismus von selbst geschieht⁵⁹⁾.

59) Eine anschauliche Darstellung des Sachverhaltes im Rahmen des Modells freier Elektronen findet sich bei García-Moliner & Flores (/4,§3.1.1/)

Durch Integration der Oberflächenzustandsdichte über den Fermikörper und Anwendung der Ladungsneutralitätsbedingung (4.39) gelangt man zu folgender Summenregel für die Reflexionskoeffizienten $A_{\mu\nu}$:

$$(4.69) \quad N_F^{SS} + \frac{A}{(2\pi)^2} \left(\int_{\overline{BZ}_1} \frac{1}{\pi} \eta_F(\vec{k}_{||}) + \frac{1}{4} g_F(\vec{k}_{||}) d^2 k_{||} + \frac{1}{2\pi} \Delta \beta_F(z_0) \right) \\ = \frac{1}{2e} \left(\int_{-\infty}^{z_0} g_{ion}(z) dz + \int_{z_0}^{\infty} g_{ion}^{ev}(z) dz \right)$$

Hierbei ist

$$(4.70) \quad N_F^{SS} := \int_{-\infty}^{E_F} \int_{\overline{BZ}_1} N^{SS}(E, \vec{k}_{||}) d^2 k_{||} dE$$

die Zahl der Oberflächenzustände unterhalb der Fermienergie,

$$(4.71) \quad \eta_F(\vec{k}_{||}) := \frac{1}{2} \arg(\det(\underline{A}(E_F, \vec{k}_{||})))$$

die "kollektive Streuphase" bei der Fermienergie,

$$(4.72) \quad g_F(\vec{k}_{||}) := \sum_{E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{||}) \leq E_F} \operatorname{Re}(A_{\mu\nu}(E_{\nu}^{\mu}(\vec{k}_{||}), \vec{k}_{||}) \cdot C_{\mu\nu}(\vec{k}_{||}))$$

das Gewicht, mit dem die Maxima und Minima der eindimensionalen Bandstruktur bei $\vec{k}_{||}$ zur Zahl der oberflächenadaptierten Volumenzustände beitragen und

$$(4.73) \quad \Delta \beta_F(z_0) := d \cdot \int_{-\infty}^{E_F} \int_{\overline{BZ}_1} \sum_{\mu=1}^{2G} D_{\mu\mu}(E, \vec{k}_{||}, z_0) d^2 k_{||} dE$$

die totale Phasenkorrektur aller Blochwellen unterhalb E_F . Die von Appelbaum & Blount (/116/) aufgestellte Regel wird damit im wesentlichen bestätigt und durch Präzisierungen ergänzt.

5. Eine numerische Realisierung in Form eines APW-artigen Verfahrens

5.1 Die Diskretisierung des Einzelschicht-Randwertproblems

5.1.1 Die variationelle Formulierung

Will man zur numerischen Approximation der Einzelschichtgreenfunktion nicht überall glatte Ansatzfunktionen verwenden, ist es vorteilhaft, die Randwertaufgabe (2.118) als Variationsproblem zu formulieren (siehe Abschnitt 2.3.3). Das Funktional $\hat{J}$, dessen stationäre Punkte die (Näherungs-) Lösungen des Einzelschichtproblems liefern, wird man in diesem Fall aus der vom Autor (/51/) angegebenen Schar wählen. Aus Gründen, die an anderer Stelle (/36, S.51 ff./) ausführlich dargelegt sind, ist es zweckmäßig, die hierbei auftretenden freien Gewichtsparameter bis auf einen mit festen Werten zu belegen, sodaß schließlich folgender Variationsausdruck resultiert:

$$\begin{aligned}
 \hat{J}(\varphi) = & \int_{\Omega_0 \cup \Omega_1} |\vec{\nabla} \varphi|^2 + (W-E)|\varphi|^2 d^3r + \alpha \|\varphi\|_{1/2,F}^2 + \\
 (5.1) \quad & + 2 \operatorname{Re} \int_S \partial_n \varphi_1^* (\varphi_0 - \varphi_1) d\sigma + \int_S |\varphi_0 - \varphi_1|^2 g d\sigma - \\
 & - 2 \operatorname{Re} \langle b | \varphi \rangle_F
 \end{aligned}$$

Die zugrunde liegende Situation ist hierbei, daß die Einheitszelle Ω durch die Ausnahmefläche S in zwei Bereiche Ω_0 und Ω_1 zerteilt wird (siehe Fig. 5.1); die zu variierenden Ansatzfunktionen φ gehören in Ω_0 und Ω_1 jeweils zur Klasse $W_2^{(2)}$ und erfüllen die planare Blochbedingung (2.18) für $\alpha = 0$ als wesentliche Randbedingung, brauchen aber längs der Fläche S nicht stetig zu sein. Die Ausstrahlungsbedingung (2.17) und die Stetigkeit der Wellenfunktion φ und ihrer Normalenableitung $\partial_n \varphi$ längs S - zu verstehen als Gleichheit zwischen den bezüglich Ω_0 bzw. Ω_1 gebildeten Spuren $\partial_n^\alpha \varphi_0$ und $\partial_n^\alpha \varphi_1$ ($\alpha = 0, 1$) - sind als natürliche Randbedingungen zu betrachten. Mit Hilfe der noch frei zu wählenden Gewichtsfunktion g kann bei einer approximativen Lösung die Forderung nach Stetigkeit längs S mehr oder weniger betont werden.

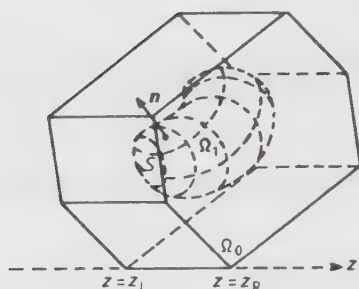


Fig. 5.1: Partition der Elementarzelle

Für APW-artige Verfahren (/117/; /40/) ist kennzeichnend, daß die Ausnahme-
fläche S folgende spezielle Gestalt hat: Bezeichnen die Ortsvektoren
 $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_b$ die (relative) Lage der Basisatome der zugrunde liegenden Kri-
stallstruktur innerhalb der Elementarzelle Ω , so konstruiert man Kugeln
 $K(\vec{r}_j, r_j)$ um $\vec{r}_j$, deren Radien r_j so zu wählen sind, daß sich die Kugeln
nicht durchdringen und ganz in Ω enthalten sind. Vom (Modell-)Potential w
nimmt man an, daß es innerhalb jeder Kugel eine bloße Radialabhängigkeit

$$(5.2) \quad w(\vec{r}) = v_{\text{sph}}(|\vec{r} - \vec{r}_j|) \quad \text{für} \quad |\vec{r} - \vec{r}_j| < r_j$$

aufweist, sodaß man lokal die Lösungen der Schrödingergleichung explizite
in Form einer Reihenentwicklung (Drehimpulsdarstellung) angeben kann;
außerhalb der Kugeln unterliegt das Potential keinen speziellen Beschrän-
kungen ("Warped-Muffin-Tin"-Form), weswegen hier eine andere Darstellung
der Ansatzfunktionen ⁶⁰⁾ angezeigt ist, die allerdings im allgemeinen
nicht glatt an die Reihenentwicklung im Innenbereich

$$(5.3) \quad \Omega_1 := \bigcup_{j=1}^b K(\vec{r}_j, r_j)$$

angepaßt werden kann. Somit ist die Fläche S in diesem Fall durch

$$(5.4) \quad S = \partial\Omega_1 = \bigcup_{j=1}^b \partial K(\vec{r}_j, r_j)$$

gegeben.

60) Im APW-Verfahren beispielsweise wird eine Entwicklung nach (dreidimen-
sionalen) ebenen Wellen benutzt.

5.1.2 Die spezielle Wahl der Ansatzfunktionen

Im Hinblick auf die Darstellung der durchgeführten Modellrechnungen genügt es, sich auf den Fall einer Kristallstruktur mit einatomiger Basis ($b = 1$) zu beschränken; wir setzen dies im folgenden Einfachheit halber voraus.

Im Inneren der Muffin-Tin-Kugel $\Omega_1 = K(\vec{0}, r_0)$ benutzen wir als Ansatzfunktionen Linearkombinationen von speziellen Lösungen der Schrödingergleichung zum sphärisch symmetrischen Potential V_{sph} (bei der vorgegebenen Energie E):

$$(5.5) \quad \varphi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^L \sum_{|m| \leq l} A_{lm} \cdot R_l(E, r) \cdot Y_{lm}(\vec{r}^0) \quad \text{für } r := |\vec{r}| < r_0$$

Hierbei sind Y_{lm} die auf der Einheitssphäre in $\mathbb{R}^3$ definierten Kugelfunktionen

$$(5.6) \quad Y_{lm}(t, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(t) e^{im\varphi}$$

($t := \cos\vartheta$, wenn (ϑ, φ) die sphärischen Polarkoordinaten von $\vec{r}^0 := \vec{r}/r$ sind; P_l^m bezeichnet die zugeordneten Legendreschen Funktionen (/118, Formel 8.6.6/)),

während die Funktionen $R_l(E, \cdot)$ im Intervall $(0, r_0]$ der Radialgleichung

$$(5.7) \quad \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + E - V_{\text{sph}}(r) \right] R_l(E, r) = 0$$

genügen und bei $r = 0$ regulär bleiben.

Im Außenbereich $\Omega_0 = \Omega \setminus \Omega_1$ setzen wir die Wellenfunktion an als eine endliche Fouriersche Summe der Gestalt (2.78), wobei die z -Abhängigkeit der planaren Fourierkoeffizienten in Form einer (endlichen) Tschebyscheff-Reihe berücksichtigt wird:

$$(5.8) \quad \varphi(\vec{r}) = \sum_{n=0}^N \sum_{\vec{g}} B_{n\vec{g}} T_n(\xi) e^{i(\vec{K}_n + \vec{g}) \cdot \vec{r}_\parallel} \quad \text{für } \vec{r} \notin K(\vec{0}, r_0)$$

Die Summation der $\vec{g}$ -Vektoren erstreckt sich dabei über einige Schalen im reziproken Gitter G_2^* , $T_n(\xi) = \cos(n \cdot \arccos \xi)$ sind die Tschebyscheffschen

Polynome (/118, ch.22/) und $\xi \in [-1, 1]$ parametrisiert das Intervall $[z_L, z_L + d]$ vermöge $z = z_L + (1 + \xi)d/2$. Wählt man die Lage der Schichtgrenzen symmetrisch zur MT-Kugel $K(\vec{0}, r_0)$ und $d = 2r_0$, gilt die einfache Beziehung $\xi = z/r_0$.

Der Ansatz (5.8) genügt zum einen der planaren Blochbedingung (2.18); er bietet zum anderen den Vorteil, daß sich die Wirkung des Operators Δ in der Randbedingung (2.17) auf die planaren Fourierkoeffizienten

$$(5.9) \quad u(\vec{g}, \xi) = \sum_{n=0}^N B_{n\vec{g}} \cdot T_n(\xi)$$

leicht angeben läßt:

$$(5.10) \quad \hat{\Delta}_{\vec{g}} u(\vec{g}, \pm 1) \pm \partial_{\xi} u(\vec{g}, \pm 1) = \hat{b}_{\vec{g}}^{\pm}$$

mit

$$(5.11) \quad \hat{\Delta}_{\vec{g}} := \alpha (|\vec{k}_n + \vec{g}|^2 + E_0(\vec{k}_n))^{1/2} \cdot r_0, \quad ,$$

wenn der Randwert b gegeben ist in der Form

$$(5.12) \quad b(\vec{r}_n) = (b_R(\vec{r}_n), b_L(\vec{r}_n)) = \sum_{\vec{g}} \frac{1}{r_0} (\hat{b}_{\vec{g}}^+, \hat{b}_{\vec{g}}^-) e^{i(\vec{k}_n + \vec{g})\vec{r}_n}.$$

Für eine Darstellung der z -Abhängigkeit mit Hilfe von Tschebyscheff-Polynomen sprechen mehrere Argumente. Einmal lassen sich für alle vom Potential w unabhängigen Matrixelemente des Funktionals (5.1) analytische Ausdrücke ableiten, die auch für numerische Zwecke durchaus praktikabel sind; es treten hierbei nur elementare Funktionen oder spezielle Funktionen der mathematischen Physik auf. Zum zweiten gestalten sich aber auch die etwas heiklen numerischen Integrationen, die bei der Berechnung der potentialabhängigen Matrixelemente durchzuführen sind, recht problemlos, weil man in diesem Fall die hohe Konvergenzgeschwindigkeit der Gauß-Integration mit dem Vorteil äquidistanter Stützstellen vereinen kann. Des weiteren bietet eine Tschebyscheff-Entwicklung die Möglichkeit, die Approximationsgüte der planaren Fourierkoeffizienten (5.9) unmittelbar anhand der Entwicklungskoeffizienten $B_{n\vec{g}}$ zu kontrollieren (/119, Vol.I, §8.5.3/). Schließlich

gestattet gerade die Verwendung von Tschebyscheff-Polynomen eine bemerkenswerte Reduktion des Aufwandes an Rechenzeit und Speicherplatz, der für die Matrixelemente an einer Rechenanlage erbracht werden muß. Aufgrund der Beziehung⁶¹⁾

$$(5.13) \quad 2 \cdot T_n(\xi) \cdot T_m(\xi) = T_{m+n}(\xi) + T_{|n-m|}(\xi)$$

beträgt nämlich die Zahl der unabhängigen Matrixelemente pro planaren Gittervektor nicht wie im allgemeinen Fall $(N+1)(N+2)/2$, sondern nur $2N+1$.

5.1.3 Die Bestimmungsgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten

Durch Einsetzen der Ansätze (5.5), (5.8) und (5.12) in den Variationsausdruck (5.1) und Variation der unabhängigen Entwicklungskoeffizienten $B_{n\vec{g}}$ und A_{lm} erhält man für diese ein inhomogenes lineares Gleichungssystem. Da zur Berechnung der (approximativen) Komponenten G_{XY} ($X, Y = R, L$) der Schichtstreu matrix allein die Kenntnis der Koeffizienten $B_{n\vec{g}}$ ausreicht, eliminiert man zweckmäßigerweise die Unbekannten A_{lm} ; das resultierende Gleichungssystem lautet dann

$$(5.14) \quad \sum_{p\vec{g}'} \hat{M}_{n\vec{g}, p\vec{g}'} B_{p\vec{g}'} = \hat{b}_{n\vec{g}}^+ + (-1)^n \hat{b}_{n\vec{g}}^- ,$$

wobei sich $\hat{M}$ als Summe hermitescher Matrizen

$$(5.15) \quad \hat{M} = \underline{M}^{(1)} + \underline{M}^{(0)} + \underline{A} + \sum_{l=0}^L \frac{r_0^2}{A} (r_0 L_l - g) \underline{SS}^{(1)}$$

schreiben läßt, die folgendermaßen definiert sind:

Bezeichnet

$$(5.16) \quad (f|g) := \int_{-1}^1 f(\xi)^* g(\xi) d\xi$$

das Skalarprodukt auf $L_2(-1,1)$, so ist

61) Da $T_n(\cos \vartheta) = \cos(n\vartheta)$, sind die meisten Rechenregeln für Tschebyscheff-Polynome einfach Umschreibungen wohlbekannter Beziehungen zwischen trigonometrischen Funktionen, wie hier des Additionstheorems.

$$\begin{aligned}
 M_{n\vec{g},p\vec{g}'}^{(i)} := & \left[(\vec{k}_n + \vec{g}) (\vec{k}_n + \vec{g}') r_0^2 - E r_0^2 \right]^{1-i} * \\
 & * \left\{ \delta_{\vec{g}\vec{g}'} \left[(T_n^{(i)} | T_p^{(i)}) - \frac{r_0^2 \pi}{A} (T_n^{(i)} | 1 - \xi^2 | T_p^{(i)}) \right] - \right. \\
 (5.17) \quad & - (1 - \delta_{\vec{g}\vec{g}'}) \frac{r_0^2 \pi}{A} \cdot \frac{2}{|\vec{g}-\vec{g}'| r_0} T J_1 T_{np}^{(i)} (|\vec{g}-\vec{g}'| r_0) \left. \right\} + \\
 & + (1-i) \left[\xi^2 \frac{r_0^2 \pi}{A} \cdot T J_0 T_{np} (|\vec{g}-\vec{g}'| r_0) + T V T_{n\vec{g},p\vec{g}'} \right]
 \end{aligned}$$

mit

$$(5.18) \quad T J_1 T_{np}^{(i)}(\gamma) := (T_n^{(i)} | \sqrt{1-\xi^2} J_1(\gamma \sqrt{1-\xi^2}) | T_p^{(i)})$$

$$(5.19) \quad T J_0 T_{np}(\gamma) := (T_n | J_0(\gamma \sqrt{1-\xi^2}) | T_p)$$

(J_m ist die Bessel-Funktion erster Art zur Ordnung m)
und einem potentialabhängigen Term $T V T_{n\vec{g},p\vec{g}'}$, der erst im übernächsten Abschnitt genauer diskutiert werden soll. Ferner ist

$$(5.20) \quad \mathcal{A}_{n\vec{g},p\vec{g}'} := \delta_{\vec{g}\vec{g}'} \hat{\mathcal{A}}_{\vec{g}} (1 + (-1)^{n+p})$$

und

$$(5.21) \quad S S_{n\vec{g},p\vec{g}'}^{(1)} := \sum_{|m| \leq 1} T S_{1m,n\vec{g}} \cdot T S_{1m,p\vec{g}'}$$

mit

$$(5.22) \quad T S_{1m,n\vec{g}} := (1 + (-1)^{1+m+n}) \cdot N_1^m \cdot c_m(\vec{g}) \cdot P J T_{1mn}(|\vec{k}_n + \vec{g}| r_0),$$

wobei

$$(5.23) \quad N_1^m := \sqrt{\frac{21+1}{2} \cdot \frac{(1-m)!}{(1+m)!}}$$

$$(5.24) \quad P J T_{1mn}(\gamma) := \int_0^1 P_1^m(\xi) J_m(\gamma \sqrt{1-\xi^2}) T_n(\xi) d\xi$$

und $c_m(\vec{g})$ nur von der Richtung des Vektors

$\vec{k}_n + \vec{g} = |\vec{k}_n + \vec{g}| (-\sin(\vartheta(\vec{g})) \vec{e}_x + \cos(\vartheta(\vec{g})) \vec{e}_y)$ abhängt:

$$(5.25) \quad c_m(\vec{g}) := \begin{cases} \sqrt{2\pi} & \leftarrow m = 0 \\ 2\sqrt{\pi} \cos(m\varphi(\vec{g})) & \leftarrow m \geq 1 \\ 2\sqrt{\pi} \sin(|m|\varphi(\vec{g})) & \leftarrow m \leq -1 \end{cases}$$

Schließlich bezeichnet

$$(5.26) \quad L_1 := L_1(E, r_0) := \frac{d}{dr} R_1(E, r_0) / R_1(E, r_0)$$

die logarithmische Ableitung der Radialfunktion R_1 am MT-Radius. Der "Stetigkeitsparameter" $g \in \mathbb{R}$ ist frei wählbar und entspricht der (auf $gK(\vec{0}, r_0)$ konstant angesetzten) Gewichtsfunktion im vierten Term des Variationsausdruckes (5.1).

Die Entwicklungskoeffizienten A_{lm} lassen sich - sofern man sie benötigt - nach Auflösung des LGS (5.14) mit Hilfe der Beziehung

$$(5.27) \quad A_{lm} \cdot R_1(E, r_0) = \sum_{ng} TS_{lm, ng} B_{ng}$$

berechnen.

5.1.4 Die Behandlung der vom Potential unabhängigen Matrixelemente

Für die in Def.(5.17)-(5.24) auftretenden Integrale findet man unter Verwendung einschlägiger Integraltafeln (/120, §6.681ff./; /118, §11.4./; /119, Vol.I, §8.5/) folgende Darstellungen:

$$(5.28) \quad T_{J_0 T_{np}}(\gamma) = \frac{\pi}{4} \hat{\delta}_{n+p} \sum_{\alpha, \beta=\pm 1} \sum_{J_0} J_{J_0}(\alpha n + \beta p, \gamma/2)$$

wobei

$$(5.29) \quad \hat{\delta}_k := \begin{cases} 1 & \text{für } k \in 2\mathbb{Z} \\ 0 & \text{für } k \in 1+2\mathbb{Z} \end{cases}$$

und

$$(5.30) \quad JJ_0(k, x) := (-1)^{k/2} J_{(1+k)/2}(x) \cdot J_{-(1+k)/2}(x) \quad .$$

Ferner

$$(5.31) \quad \begin{aligned} TJ_1 T_{np}^{(0)}(\gamma) &= \\ &= \frac{\pi}{4} \hat{\delta}_{n+p} \sum_{\alpha=\pm 1} \left[JJ_1(n+\alpha p, \gamma/2) - \frac{1}{2} \sum_{\beta=\pm 1} JJ_1(n+\alpha p+2\beta, \gamma/2) \right] \end{aligned}$$

sowie

$$(5.32) \quad TJ_1 T_{np}^{(1)}(\gamma) = n \cdot p \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \hat{\delta}_{n+p} \sum_{\alpha=\pm 1} \alpha JJ_1(n-\alpha p, \gamma/2)$$

mit

$$(5.33) \quad JJ_1(k, x) := (-1)^{k/2} J_{(1+k)/2}(x) \cdot J_{(1-k)/2}(x)$$

Durch Übergang zur Grenze $\gamma \rightarrow 0_+$ findet man

$$(5.34) \quad (T_n | 1 - \xi^2 | T_p) = \frac{1}{2} \hat{\delta}_{n+p} \sum_{\alpha=\pm 1} (q_{n+\alpha p} - \frac{1}{2} \sum_{\beta=\pm 1} q_{n+\alpha p+2\beta})$$

$$(5.35) \quad (T_n' | 1 - \xi^2 | T_p') = n \cdot p \cdot \hat{\delta}_{n+p} (q_{n-p} - q_{n+p})$$

wobei

$$(5.36) \quad q_k := (1 - k^2)^{-1}$$

und

$$(5.37) \quad (T_n | T_p) = \hat{\delta}_{n+p} (q_{n+p} + q_{n-p})$$

Die Berechnung der Matrixelemente

$$(5.38) \quad (T_n' | T_p') = 4 \cdot n \cdot p \cdot t_{np} \cdot \hat{\delta}_{n+p}$$

mit

$$\begin{aligned}
 t_{np} &:= \sum_{r=0}^{n/2-1} \sum_{s=0}^{p/2-1} q_2(r+s+1) + q_2(r-s) \quad \Leftarrow \quad n, p \in 2\mathbb{Z} \\
 (5.39) \\
 t_{np} &:= -\frac{1}{2} + \sum_{r=0}^{(n-1)/2} \sum_{s=0}^{(p-1)/2} q_2(r+s) + \sum_{r=1}^{(n-1)/2} \sum_{s=1}^{(p-1)/2} q_2(r-s) \quad \Leftarrow \quad n, p \in 1+2\mathbb{Z}
 \end{aligned}$$

erfolgt zweckmäßigerweise über ein Rekursionsschema für die Faktoren t_{np} .

Die Integrale PJT_{lmn} lassen sich in der Weise behandeln, daß man zunächst für $l+m+n \in 2\mathbb{Z}$ die Koeffizienten a_k^{nlm} der Polynome

$$(5.40) \quad T_n(x) \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \sum_{k=0}^{(n+1-m)/2} a_k^{nlm} x^{2k}$$

(P_l bezeichnet die Legendre-Polynome)
bestimmt und dann die Beziehung

$$(5.41) \quad PJT_{lmn}(\gamma) = (-1)^m \sum_{k=0}^{(n+1-m)/2} a_k^{nlm} b_{mk}(\gamma)$$

mit

$$(5.42) \quad b_{mk}(x) := [1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2k-1)] \cdot x^{-k} \cdot j_{m+k}(x)$$

(j_m ist die sphärische Bessel-Funktion erster Art zur Ordnung m) benutzt. Die numerische Auswertung dieser (alternierenden) Summe erfordert allerdings ein wohlüberlegtes Vorgehen; treten doch beispielsweise für $|\gamma| \leq 10$ bei manchen lmn -Werten Summanden auf, die um zehn Zehnerpotenzen größer sind als der Wert der Summe selbst, sodaß die Gefahr eines starken Stellenschwundes besteht, der man mit erhöhter Rechengenauigkeit begegnen muß. In diesem Zusammenhang erweist sich für Kontrollzwecke die Summenregel

$$(5.43) \quad \left(\sum_{l=0}^{\infty} \underline{SS}^{(1)} \right)_{n\vec{g}, p\vec{g}'} = 2\pi TJOT_{np}(|\vec{g}-\vec{g}'|r_0)$$

als recht nützlich.

5.1.5 Die potentialabhängigen Matrixelemente

Abgesehen von den durch (numerische) Integration der Radialgleichung (5.7) zu gewinnenden logarithmischen Ableitungen L_1 der Radialfunktionen drückt sich die Abhängigkeit der Matrix $\hat{M}$ in Gl.(5.15) vom Potential w im Auftreten des additiven Gliedes $\underline{TVT}$ in Gl.(5.17) aus, welches folgendermaßen definiert ist:

$$(5.44) \quad TVT_{n\vec{g},p\vec{g}'} := \frac{r_0^2}{A} (T_n | \Delta V(\vec{g}, \vec{g}', \xi) | T_p)$$

mit $\Delta V(\vec{g}, \vec{g}', \xi) = VPW(\vec{g}-\vec{g}', \xi) - BV(|\vec{g}-\vec{g}'|, \xi)$, wobei

$$(5.45) \quad VPW(\vec{g}, \xi) := \int_Z w(\vec{r}_n, r_0 \xi) e^{-i\vec{g}\vec{r}_n} d^2 r_n$$

$$(5.46) \quad BV(g, \xi) := \int_0^{r_0 \sqrt{1-\xi^2}} V_{sph}(\sqrt{g^2 + (r_0 \xi)^2}) 2\pi J_0(g\xi) \xi d\xi$$

Man beachte, daß $VPW - BV$ als Integral über Schnitte des Außenbereiches Ω_0 mit den Ebenen $z = r_0 \xi$ aufgefaßt werden kann, sodaß die Coulombsingularität des Potentials bei $\vec{r} = \vec{0}$ (ähnlich wie bei einem Pseudopotential) ausgespart bleibt.

Da im allgemeinen für das Potential nur eine numerische Darstellung verfügbar ist, muß man sich die Matrixelemente von $\underline{TVT}$ mit Hilfe numerischer Integration verschaffen. Aufgrund der Beziehung (5.13) genügt hierzu die Berechnung von $(T_p | \Delta V(\vec{g}, \vec{g}', \cdot) | T_p)$ für $p = 0, \dots, 2N$. Sofern sich (wie im Falle eines einfachen Muffin-Tin-Potentials) die ξ -Abhängigkeit der Quasifourierkoeffizienten $\Delta V(\vec{g}, \vec{g}', \xi)$ als endliche Summe von Funktionen der Form

$$(5.47) \quad f(\xi) = f(1) + \sqrt{1-\xi^2} g(\xi)$$

beschreiben läßt mit Funktionen $g(\xi)$, deren erste Ableitung bis auf endlich viele beschränkte Sprünge im Intervall $[-1, 1]$ stetig ist, empfiehlt es sich, die Integration aufzuspalten in

$$(5.48) \quad (T_p | f) = f(1) \cdot 2 \cdot q_p \cdot \hat{\delta}_p + (T_p | \tilde{f})$$

mit $\tilde{f}(\xi) := f(\xi) - f(1)$ und die Quadraturformel

$$(5.49) \quad (T_p | \tilde{f}) \approx T_p^{(M)}(\tilde{f}) := \frac{\pi}{2M+1} \sum_{j=0}^{2M} \sin(\theta_j) \cdot \cos(p\theta_j) \cdot \tilde{f}(\cos(\theta_j))$$

mit den äquidistanten Stützstellen

$$(5.50) \quad \theta_j := \frac{\pi}{4M+2} (2j+1) \quad ; \quad j = 0, \dots, 2M$$

zu verwenden. Diese läßt sich als Gaußsche Integrationsformel (mit $(1-\xi^2)^{1/2} T_p(\xi) \tilde{f}(\xi)$ als Integrand und $(1-\xi^2)^{-1/2}$ als Gewicht) auffassen (/118, 25.4.38/) und ist demzufolge exakt, wenn $g(\xi)$ in (5.47) ein Polynom ist, dessen Grad $4M-1-p$ nicht übersteigt.

Bemerkenswert ist hierbei, daß man neben der bekannten Abschätzung des Restgliedes für hinreichend glatte Integranden (/121, 3.5.24/) auch noch eine zweite für weniger reguläre Integranden der oben genannten Art zur Verfügung hat, die überdies in der Praxis oft unmittelbar anwendbar ist. Der Grund hierfür ist, daß gerade die Tschebyscheff-Polynome eine diskrete Orthogonalitätsrelation mit $\xi_j = \cos(\theta_j)$ als Stützstellen erfüllen (/118, 22.17/; /119, Vol.I, §8.5.4/) und daher

$$(5.51) \quad c_p^M(\tilde{f}) := \frac{2}{\pi} T_p^{(M)}(\tilde{f}) \quad (p = 0, \dots, 2M)$$

nicht anderes als die diskreten Tschebyscheff-Koeffizienten der Funktion $(1-\xi^2)^{1/2} \tilde{f}(\xi)$ sind (/119, Vol.I, p.308/). Andererseits besitzt diese Funktion unter den genannten Voraussetzungen eine Entwicklung als (punktweise) konvergente Tschebyscheff-Reihe, deren Koeffizienten gegeben sind durch

$$(5.52) \quad c_p^\infty(\tilde{f}) = \frac{2}{\pi} (T_p | \tilde{f})$$

und die sich mit $c_p^M(\tilde{f})$ vergleichen lassen gemäß

$$(5.53) \quad c_p^M = c_p^\infty + \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i c_{i(4M+2)-p}^\infty + \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i c_{i(4M+2)+p}^\infty$$

(/119, Vol. I, p. 309/), sodaß das Restglied in (5.49) lautet:

$$(5.54) \quad R_p^M(\tilde{r}) = \frac{\pi}{2} (c_{4M+2-p}^\infty(\tilde{r}) + c_{4M+2+p}^\infty(\tilde{r}) - \dots)$$

Bei der numerischen Bestimmung der Stützwerte $\Delta V(\vec{g}, \vec{g}', \xi_j)$ ist es von Vorteil, eine Integrationsmethode zu benutzen, die der planaren Translationssymmetrie des Integranden Rechnung trägt (/122/-/126/). Im Falle eines einfachen Muffin-Tin-Potentials

$$(5.55) \quad w(\vec{r}) = -\frac{Z(r)}{r} \theta(r_{APW} - |\vec{r}|)$$

($r_{APW} > r_0$, $Z(r)$ effektive Ladung, $\theta(x)$ Heaviside-Funktion) ist es allerdings einfacher, das Integrationsproblem auf eindimensionale Quadraturen zurückzuführen:

$$(5.56) \quad \begin{aligned} \Delta V(\vec{g}, \vec{g}', \xi) &= -2\pi [ZJ_0(|\vec{g}-\vec{g}'|) + \\ &+ \sum_{n \neq 0} \theta(r_{APW} - |r_0 \xi - nd|) \cdot e^{in(\vec{g}' - \vec{g}) \cdot \vec{a}_{311}} \cdot ZJ_n(|\vec{g}-\vec{g}'|)] \end{aligned}$$

wobei

$$(5.57) \quad ZJ_0(g) := \int_{r_0}^{r_{APW}} Z(r) J_0(g \sqrt{r^2 - r_0^2 \xi^2}) dr$$

$$(5.58) \quad ZJ_n(g) := \int_{|nd-r_0\xi|}^{r_{APW}} Z(r) J_n(g \sqrt{r^2 - (nd-r_0\xi)^2}) dr$$

5.1.6 Vereinfachungen durch den Einfluß der Kristallsymmetrie

Im allgemeinen Fall besitzt die hermitesche Matrix $\hat{M}$ die aus dem Separationsansatz (5.8) resultierenden Symmetrien

$$(5.59) \quad \hat{M}_{n\vec{g}, p\vec{g}'} = \hat{M}_{p\vec{g}, n\vec{g}'} \quad ; \quad \hat{M}_{n\vec{g}, p\vec{g}'} = \hat{M}_{n\vec{g}', p\vec{g}}^* \quad ;$$

weitere treten hinzu, falls die Raumgruppe der zugrunde liegenden Kristallstruktur eine der folgenden Operationen enthält:

a) Spiegelebene parallel zu F_R und F_L ($w(\vec{r}_{ii}, -z) = w(\vec{r}_{ii}, z)$) :

$$(5.60) \quad \hat{M}_{n\vec{g}, p\vec{g}'} = 0, \quad \text{falls } n+p \text{ ungerade}$$

b) Zweizählige Drehachse senkrecht zu F_R und F_L ($w(-\vec{r}_{ii}, z) = w(\vec{r}_{ii}, z)$) :

$$(5.61) \quad \hat{M}_{n\vec{g}, p\vec{g}'} \text{ ist reell}$$

c) Inversionssymmetrie ($w(-\vec{r}) = w(\vec{r})$) :

$$(5.62) \quad \hat{M}_{n\vec{g}, p\vec{g}'} \text{ ist } \begin{cases} \text{reell, falls } n+p \text{ gerade} \\ \text{imaginär, falls } n+p \text{ ungerade} \end{cases}$$

Im Falle a) entkoppelt das Gleichungssystem (5.14) in zwei gleich strukturierte lineare Gleichungssysteme der halben Dimension; im Falle c) hat es bei geeigneter Anordnung der Indizes die Form

$$(5.63) \quad \begin{pmatrix} \underline{M}_{++} & i\underline{K} \\ -i\underline{K}^T & \underline{M}_{--} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{B}_+ \\ \underline{B}_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{b}_+ \\ \underline{b}_- \end{pmatrix} .$$

Hierbei sind $\underline{M}_{++}$, $\underline{M}_{--}$ und $\underline{K}$ reelle Matrizen der halben Dimension von $\hat{M}$; $\underline{M}_{++}$ und $\underline{M}_{--}$ sind überdies symmetrisch. Daher läßt sich die Inversion von $\hat{M}$ auf eine viermalige Inversion reell-symmetrischer Matrizen mit halber Dimension zurückführen:

$$(5.64) \quad \underline{R}_+ = (\underline{M}_{++} - \underline{K} \underline{M}_{--}^{-1} \underline{K}^T)^{-1} \underline{b}_+$$

$$\underline{R}_- = (\underline{M}_{--} - \underline{K}^T \underline{M}_{++}^{-1} \underline{K})^{-1} \underline{b}_-$$

$$(5.65) \quad \underline{B}_+ = \underline{R}_+ - i \underline{M}_{++}^{-1} \underline{K} \underline{R}_-$$

$$\underline{B}_- = \underline{R}_- + i \underline{M}_{--}^{-1} \underline{K}^T \underline{R}_+$$

Ein Vorgehen nach diesem Schema erweist sich vor allem deshalb als vorteilhaft, weil zur numerischen Lösung symmetrischer (nicht notwendig positiv definiten) linearer Gleichungssysteme ein spezieller, Speicherplatz sparender Algorithmus (/127/) eingesetzt werden kann.

5.1.7 Numerische Details

Das Generieren der Matrixelemente von $\hat{M}$ erfordert die häufige Auswertung der Besselfunktionen J_m und der sphärischen Besselfunktionen j_m , sodaß man hierfür effiziente Routinen benötigt. Sollen die Funktionswerte zu fester Ordnung m an einer Vielzahl von Stützstellen bestimmt werden (siehe z.B. (5.46), (5.57), (5.58)), bieten sich die von Hart (/128/) angegebenen rationalen Approximationen oder eine Darstellung als abgebrochene Tschebyscheff-Reihe (/119, Vol. II, §9.3.6/) an. Die dazu erforderlichen Stützwerte lassen sich mit dem von Gautschi (/129/) entwickelten Algorithmus mit Maschinengenauigkeit berechnen, dessen Anwendung sich im übrigen immer dann empfiehlt, wenn eine Folge von Werten von Besselfunktionen verschiedener Ordnung zu einem festen Argument auftritt (siehe (5.28)-(5.33), (5.41)-(5.42)).

Zur Berechnung der potentialabhängigen Größen wird im Falle eines MT-Potentials (5.55) die zunächst nur an diskreten Stützstellen vorliegende effektive Ladung $Z(r)$ durch eine Interpolante dargestellt. Bei den durchgeführten Modellrechnungen erwies sich die Interpolation mit Hilfe eines kubischen Quasisplines (/130/) als sehr brauchbar; die stetig differenzierbare interpolierende Funktion ist hierbei ohne großen Aufwand aus den Stützdaten zu konstruieren und im Hinblick auf die numerischen Quadraturen (5.57)/(5.58) hinreichend glatt.

Um die logarithmischen Ableitungen (5.26) zu gewinnen, wird die Radialgleichung (5.7) mit dem auf die genannte Weise interpolierten Potential numerisch integriert. Die Anwendung eines vierstufigen Runge-Kutta-Verfahrens erbrachte in den untersuchten Fällen stets ein akzeptables Ergebnis.

5.2 Das algebraische Eigenwertproblem für die komplexe Bandstruktur

5.2.1 Die planare Fourierdarstellung der Schichtstreu­matrix und des Eigenwertproblems

Die planaren Fourierkoeffizienten der Komponenten G_{XY} ($X, Y = R, L$) der Schichtstreu­matrix fassen wir zusammen zur Matrix

$$(5.66) \quad \underline{G}_{XY} = (\langle w_{\vec{g}} | G_{XY} | w_{\vec{g}'} \rangle_Z)$$

Eine endlichdimensionale Approximation hierfür erhält man, indem man das LGS (5.14) für die Randvorgaben $\hat{b}_{\vec{g}}^{\epsilon} = \delta_{\vec{g}\vec{g}_0} \delta_{\epsilon\epsilon_0}$ löst und die resultierenden planaren Fourierkoeffizienten (5.9) an den Randstellen $\xi = \pm 1$ auswertet (vgl. Abschnitt 3.1.5); bezeichnet $B_{n\vec{g}}^{\vec{g}_0\epsilon_0}$ die zu diesen Randvorgaben gehö­renden Entwicklungskoeffizienten, führt dies auf die einfache Beziehung

$$(5.67) \quad \begin{aligned} G_{RR}(\vec{g}, \vec{g}') &= \sum_{n=0}^N B_{n\vec{g}}^{\vec{g}'} & G_{RL}(\vec{g}, \vec{g}') &= \sum_{n=0}^N B_{n\vec{g}}^{\vec{g}'} \\ G_{LR}(\vec{g}, \vec{g}') &= \sum_{n=0}^N (-1)^n B_{n\vec{g}}^{\vec{g}'} & G_{LL}(\vec{g}, \vec{g}') &= \sum_{n=0}^N (-1)^n B_{n\vec{g}}^{\vec{g}'} \end{aligned}$$

Im Hinblick auf eine Minimierung des Rechenaufwandes sollte zur Berechnung der Koeffizienten $B_{n\vec{g}}^{\vec{g}_0\epsilon_0}$ keinesfalls die Matrix $\hat{M}$ in Gl.(5.14) invertiert werden, sondern vielmehr das Gleichungssystem sukzessiv für die $2 * \text{Anz} \{ \vec{g} \}$ rechten Seiten $\hat{b}_{\vec{g}}^{\epsilon}$ gelöst werden. Des weiteren läßt sich die Zahl der ex­plizit zu bestimmenden Matrixelemente von $\underline{G}_{XY}$ dadurch reduzieren, daß man von der Adjungiertheitsrelation (3.27) und (gegebenenfalls) von der Symme­trieeigenschaft (3.47) Gebrauch macht.

Die planare Fourierdarstellung der Reflexions- und Transmissionsoperatoren (3.20) ergibt sich aus $\underline{G}_{XY}$ durch Multiplikation mit der Diagonalmatrix $\hat{\underline{A}}$, deren Diagonalelemente in Def.(5.11) angegeben sind. Die Matrixdarstellung des Translationsoperators (2.219) ist gleichfalls diagonal:

$$(5.68) \quad \langle w_{\vec{g}} | T(\vec{a}_{3||}) | w_{\vec{g}'} \rangle_Z = e^{-i\vec{k}_{||} \cdot \vec{a}_{3||}} e^{-i\vec{g} \cdot \vec{a}_{3||}} \delta_{\vec{g}\vec{g}'}$$

Damit lautet die algebraisierte Form der Eigenwertaufgabe (3.22):

$$(5.69) \quad \underline{\underline{e}}(\vec{a}_{3n}) \oplus \underline{\underline{e}}(\vec{a}_{3n}) \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}}_R - \underline{\underline{1}} & \underline{\underline{t}}_{RL} \\ \underline{\underline{1}} & \underline{\underline{0}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\underline{b}}_R \\ \underline{\underline{b}}_L \end{pmatrix} = t_{\perp} \begin{pmatrix} \underline{\underline{0}} & \underline{\underline{1}} \\ \underline{\underline{t}}_{LR} & \underline{\underline{R}}_L - \underline{\underline{1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{\underline{b}}_R \\ \underline{\underline{b}}_L \end{pmatrix}$$

mit

$$(5.70) \quad \underline{\underline{e}}(\vec{a}_{3n}) := \text{diag}(e^{i\vec{g} \cdot \vec{a}_{3n}})$$

5.2.2 Konditions- und Konvergenzeigenschaften

Das Eigenwertproblem (5.69) hat die Form "Pb = t_⊥Qb" mit allgemeinen komplexen Matrizen P und Q. Von beiden muß man aus den in Abschnitt 3.1.3 genannten Gründen annehmen, daß sie bezüglich Inversion schlecht konditioniert sind, weshalb zur numerischen Behandlung die Verwendung des für diese Situation konzipierten QZ-Algorithmus (/92/-/95/) angezeigt ist.

Die Approximationsgüte der Eigenwerte $t_{\perp} = \exp(ik_{\perp}d)$ nimmt mit wachsender Distanz zur Einheitskreislinie $|t_{\perp}| = 1$ und wachsender Energie ab. Eine physikalische Erklärung hierfür läßt sich leicht finden, wenn man den Fall freier oder nahezu freier Elektronen vor Augen hat: Die reellen Linien der komplexen Bandstruktur haben dann die Gestalt

$$(5.71) \quad k_{\perp}(\vec{G}) (E) = -G_{\perp}(\vec{G}) \pm \sqrt{E - |\vec{k}_{\parallel} + P_{\parallel}\vec{G}|^2},$$

wobei $\vec{G}$ das reziproke Raumgitter G_3^* durchläuft; $P_{\parallel}\vec{G}$ ist die Komponente von $\vec{G}$ in G_2^* (siehe (3.181)), $G_{\perp}(\vec{G})$ die dazu senkrechte Komponente. Bezeichnet $g_{\max}$ die Länge des betragsgrößten planaren Gittervektors im Ansatz (5.8), so kann man sicherlich alle reellen Linien $k_{\perp}(\vec{G}) (E)$ mit $|P_{\parallel}\vec{G}| > g_{\max}$ nur unzureichend oder gar nicht approximieren. Die Genauigkeit der Linien mit $|P_{\parallel}\vec{G}| \leq g_{\max}$ wird mit wachsendem Abstand zur reellen Bandstruktur verkleinert, weil das Abklingverhalten der exponentiell gedämpften Blochwellen durch die abgebrochene Tschebyscheff-Reihe (5.9) immer weniger gut

wiedergegeben werden kann, was aufgrund der Identität

$$(5.72) \quad e^{i\kappa r_0 \xi} = I_0(\kappa r_0) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} I_n(\kappa r_0) \cdot T_n(\xi)$$

(I_n = modifizierte Besselfunktion erster Art)
leicht einzusehen ist.

Störungstheoretische Argumente, wie sie etwa von Pendry & Forstmann (/9/) vorgebracht wurden, lassen erwarten, daß sich an dieser Situation beim "Einschalten" des Kristallpotentials nichts Wesentliches ändert, sofern alle diejenigen planaren Gittervektoren $\vec{g} = p_{\perp} \vec{g}$ im Ansatz (5.8) berücksichtigt werden, die zu freien Energiebändern $k_{\perp}^{(\vec{g})}(E)$ gehören, welche durch den Einfluß des Potentials eine starke Modifikation erfahren. Die Zweige der komplexen Bandstruktur, die mit einer gewissen Mindestgenauigkeit approximiert werden, liegen demzufolge innerhalb eines glockenförmigen "Konfidenzbereiches" über der $k_{\perp}$ -Ebene der Gestalt

$$(5.73) \quad (\text{Im } k_{\perp})^2 \leq g_{\max}^2 - E - c(D) \quad ,$$

wobei die Konstante $c(D)$ von der geforderten Stellenzahl D bestimmt wird.

In diesem Zusammenhang erhebt sich die Frage, wieviele $\vec{g}$ -Vektoren jeweils zur Berechnung der komplexen Bandstrukturen zweier kristallographisch verschiedener Oberflächen einer gegebenen Kristallstruktur erforderlich sind, um eine vergleichbare Approximationsgüte zu erhalten. Dem Vorgehen von Tong & Van Hove (/131/) folgend, formen wir die Beziehung (5.73) um, indem wir $\text{Im } k_{\perp}$ durch $\ln|t_{\perp}|$ ausdrücken und beachten, daß die Zahl der planaren Gitterpunkte pro Einheitsfläche $A/(4\pi^2)$ beträgt, sodaß also im Kreis mit Radius $g_{\max}$

$$(5.74) \quad N_g := \text{Anz} \{ \vec{g} \} = g_{\max}^2 \cdot A/(4\pi)$$

planare Gittervektoren enthalten sind. Um zu gegebener Energie E noch Blochwellen mit einem gegebenen Übertragungsfaktor $|t_{\perp}|$ beschreiben zu können, ist daher die $\vec{g}$ -Summation in (5.8) über wenigstens

$$(5.75) \quad N_g = (E \cdot A + (A/d^2)(\ln|t_{\perp}|)^2)/(4\pi)$$

Gittervektoren zu erstrecken. Definiert man die Approximationsgüte so wie die genannten Autoren über die Genauigkeit von $|t_{\perp}|$, verhalten sich die N_g -Werte zweier verschiedener Oberflächen bei vergleichbarer Qualität der Näherungen wie

$$(5.76) \quad N_g^I / N_g^{II} \approx (A_I / A_{II}) \cdot (d_{II} / d_I)^2 = (d_{II} / d_I)^3$$

(man beachte $A_I \cdot d_I = V = A_{II} \cdot d_{II}$! 62)).

Diese Abschätzung stellt allerdings insofern die Situation wohl zu pessimistisch dar, als hier die Ausdehnung der Konfidenzbereiche in der $k_{\perp}$ -Ebene in Einheiten von $2\pi/d$ verglichen wird; legt man eine Skalierung in absoluten Einheiten zugrunde - was im Hinblick auf einen direkten Vergleich der jeweiligen Genauigkeit der reellen Bandstruktur realistischer erscheint -, so ergibt sich ein Verhältnis von

$$(5.77) \quad N_g^I / N_g^{II} \approx A_I / A_{II} = d_{II} / d_I$$

entsprechend den verschiedenen Dichten der planaren Gitterpunkte beider Oberflächen. Diese Regeln konnten anhand von Konvergenzbetrachtungen im Rahmen der durchgeführten Testrechnungen recht gut verifiziert werden und decken sich mit den Beobachtungen anderer Autoren (/132/; /34/); die bei den betrachteten Oberflächen des fcc-Raumgitters auftretenden N_g -Verhältnisse sind in Tab.5.1 wiedergegeben.

Tab.5.1: Netzebenenabstandsverhältnisse beim fcc-Raumgitter

I	II	$(d_{II} / d_I)^3$	d_{II} / d_I
(110)	(111)	4.35	1.63
(110)	(100)	2.83	1.41
(100)	(111)	1.54	1.15

62) Dies wurde von Tong & Van Hove offenbar übersehen und erklärt, warum diese mit einer d^{-2} -Abhängigkeit argumentieren.

5.3 Die numerische Behandlung des Halbraumproblems

5.3.1 Die Schichtsynthese

Die numerische Bestimmung der planaren Fourierdarstellung der Reflexions- und Transmissionsoperatoren einer für einen kristallinen Halbraum repräsentativen Schichtfolge geschieht in der Weise, daß der in Abschnitt 3.2 entwickelte Formalismus mit Hilfe der Matrizen $\underline{G}_{XY}$ bzw. $\underline{R}_X$ und $\underline{T}_{XY}$ konkretisiert wird.

Zur Konvergenzkontrolle bei der Schichtverdoppelung bedient man sich hierbei der Kriterien

$$(5.78) \quad \|\underline{Q}_p^{(n+1)} - \underline{Q}_p^{(n)}\| < \varepsilon(Q)$$

$$(5.79) \quad \|\underline{R}_L^{(n+1)} \underline{Q}_{ev}^{(n+1)} - \underline{R}_L^{(n)} \underline{Q}_{ev}^{(n)}\| < \varepsilon(R)$$

(zur Bezeichnungsweise siehe Abschnitt 3.2.3); hierbei sind $\varepsilon(Q)$ und $\varepsilon(R)$ vorzugebende Genauigkeitsschranken, als Norm $\|\cdot\|$ läßt sich jede Matrixnorm verwenden. Im Falle, daß beim betrachteten $(E, \vec{k}_n)$ -Wert keine propagierenden Blochwellen existieren (d.h. $\sigma(E, \vec{k}_n) = 0$), entfällt natürlich die Abbruchbedingung (5.78) und es bleibt allein der Abstand $\|\underline{R}_L^{(n+1)} - \underline{R}_L^{(n)}\|$ zu kontrollieren.

Bei der Konstruktion der Projektoren $\underline{Q}_p^{(n)}$ und $\underline{Q}_{ev}^{(n)}$ ist es von Vorteil, die Schmidtsche Orthonormalisierung der σ Basisvektoren $\underline{s}_n^{(1)}, \dots, \underline{s}_n^{(\sigma)}$ von $L_{ev}^{(n)\perp}$ mit positivem Stromvorzeichen (vgl. (3.141)) gemäß folgender Rekursion vorzunehmen:

$$(5.80) \quad \underline{P}_0 := \underline{1}$$

$$(5.81) \quad \left. \begin{aligned} \underline{e}_\nu &:= \underline{P}_{\nu-1} \underline{s}^{(\nu)} / \|\underline{P}_{\nu-1} \underline{s}^{(\nu)}\|_2 \\ \underline{P}_\nu &:= \underline{P}_{\nu-1} - \underline{e}_\nu \underline{e}_\nu^+ \end{aligned} \right\} \quad \nu = 1, \dots, \sigma$$

$$(5.82) \quad \underline{Q}_{ev} = \underline{P}_\sigma \quad ; \quad \underline{Q}_p = \underline{1} - \underline{P}_\sigma$$

Besitzen die Volumeneinzelschichten Spiegelsymmetrie bezüglich ihrer Mittelebene und ist die Bedingung (3.48) erfüllt, zeigt eine einfache, auf der Invarianzeigenschaft (3.49) basierende Überlegung, daß die konjugiert-komplexen Vektoren $\underline{s}_n^{(\nu)*}$ auch in $L_{ev}^{(n)\perp}$ liegen mit der Konsequenz, daß $\underline{q}_p^{(n)}$ und $\underline{q}_{ev}^{(n)}$ rein reelle Matrizen sind (nicht notwendigerweise jedoch die Summanden $\underline{e}_p \underline{e}_p^+$!).

Das in dieser Weise realisierte Schichtverdoppelungsverfahren erwies sich numerisch als recht robust; bei den angestellten Testrechnungen bereitete auch eine an Maschinengenauigkeit heranreichende Präzisionsforderung (5.78)/(5.79) keinerlei Probleme. Daß hierbei die Konvergenzgeschwindigkeit - wie in Abschnitt 3.2.3 im einzelnen erläutert - vom Abklingfaktor t_{ev} (siehe (3.128)-(3.130)) bestimmt wird, konnte durch Überprüfung der Regel

$$(5.83) \quad n \approx \lg(-D/\lg(t_{ev}))/\lg(2)$$

(n = Zahl der Schichtverdoppelungen, D = geforderte Stellenzahl) verifiziert werden.

5.3.2 Die Bestimmung gebundener Halbraumzustände

Um die planaren Fourierkoeffizienten der Randwerte der Wellenfunktion im Vakuumbereich $\psi^{(V)}$ und ihrer Normalenableitung $\partial_z \psi^{(V)}$ an der Übergangsebene $z = z_V$ vom Vakuum- zum Oberflächenbereich zu gewinnen, ist die (numerische) Integration der eindimensionalen Schrödingergleichung (3.160) für alle jeweils auftretenden Werte von $\eta_{\vec{g}}$ (siehe (3.161)) erforderlich⁶³⁾. Beschränkt man sich auf gebundene Zustände (d.h. auf den Energiebereich unterhalb des Vakuumniveaus des Potentials), sind die Fourierkoeffizienten bis auf eine Normierungskonstante durch die Forderung eindeutig bestimmt, daß sie für $z \rightarrow -\infty$ ein abklingendes Verhalten zeigen sollen. Aus Gründen der Equilibrierung schreibt man sie zweckmäßigerweise in der Form

$$(5.84) \quad u^{(V)}(\vec{g}, z) = \beta_{\vec{g}} u(\eta_{\vec{g}}, z)/u(\eta_{\vec{g}}, z_V)$$

63) Hierzu stand dem Autor ein FORTRAN-Programm von Stöhr (/133;/134/) zur Verfügung.

(vgl. (3.159)-(3.162)), wobei $\beta_{\vec{g}}$ aus den Anschlußbedingungen (siehe Abschnitt 3.3.2) zu ermitteln ist. Für den speziellen Fall, daß der Volumbereich direkt an den Vakuumbereich anschließt (idealer Halbraum; $z_V = z_B$), sei deren explizite Form hier angegeben: Definiert man

$$(5.85) \quad \underline{\hat{A}} := \text{diag}(\hat{A}_{\vec{g}})$$

(vgl. (5.11)) und

$$(5.86) \quad \underline{D}_V := \text{diag}(r_0 \frac{d}{dz} u(\eta_{\vec{g}}, z_V) / u(\eta_{\vec{g}}, z_V))$$

sowie die aus den Komponenten der zu den 2ϵ Eigenwerten $|t_{\perp}^{(\nu)}| = 1$ gehörenden Eigenvektoren des EWP (5.69) aufgebauten Matrizen

$$(5.87) \quad \underline{b}_L := (b_L^{(1)}, \dots, b_L^{(2\epsilon)})$$

$$(5.88) \quad \underline{b}_R := \underline{e}(\vec{a}_{3\parallel}) (t_{\perp}^{(1)*} b_R^{(1)}, \dots, t_{\perp}^{(2\epsilon)*} b_R^{(2\epsilon)})$$

und schließlich

$$(5.89) \quad \underline{E} := (e_1, \dots, e_{\epsilon})$$

wobei $\{e_{\nu}\}$ die gemäß (5.80)-(5.81) konstruierte ONB von $L_{\text{ev}}^{\perp}$ bezeichnet, so lautet das Gl.(3.170) und (3.172) entsprechende homogene Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten $\underline{\beta} = (\beta_{\vec{g}})$ der Wellenfunktion im Außenraum und die Koeffizienten $\underline{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_{2\epsilon})$ der asymptotischen Darstellung (3.163) der Wellenfunktion tief im Volumen

$$(5.90) \quad \underline{\text{MPW}} \underline{\beta} - \underline{\text{NPW}} \underline{\alpha} = 0$$

mit der $(N_g + \epsilon) \times N_g$ - Matrix

$$(5.91) \quad \underline{\text{MPW}} := \begin{pmatrix} \underline{R}_L \underline{Q}_{\text{ev}} (\underline{\hat{A}} - \underline{D}_V) - 2 \underline{\hat{A}} \\ \underline{E}^+ (\underline{\hat{A}} - \underline{D}_V) \end{pmatrix}$$

und der $(N_g + \sigma) \times 2\sigma$ -Matrix

$$(5.92) \quad \underline{NPW} := \begin{pmatrix} (\underline{B}_L \underline{Q}_{ev} - \underline{1}) \underline{b}_L - \underline{b}_R \\ \underline{E}^+ \underline{b}_L \end{pmatrix}$$

Dieses Gleichungssystem beinhaltet $N_g + \sigma$ Gleichungen für $N_g + 2\sigma$ Unbekannte, definiert also im Regelfall einen σ -dimensionalen Lösungsraum in Übereinstimmung mit der in Abschnitt 4.1 dargelegten abstrakten Theorie.

Aus numerischen Gründen ist es vorteilhafter, nicht die spezielle Parameterdarstellung (4.3) dieses Lösungsraumes zu konstruieren, sondern folgendermaßen vorzugehen: Man verschafft sich zunächst eine Singulärwertzerlegung (/135;/61, Vol.I, thm.VI.17/) der "Matching-Matrix" MPW in der Form

$$(5.93) \quad \underline{MPW} = \underline{V} \begin{pmatrix} \underline{K} \\ \underline{0} \end{pmatrix} \underline{U}^+,$$

wobei U und V unitäre Matrizen der Dimension N_g bzw. $N_g + \sigma$ sind und $\underline{K} = \text{diag}(\kappa_1, \dots, \kappa_{N_g})$ die Diagonalmatrix der Singulärwerte $\kappa_1 \geq \kappa_2 \geq \dots \geq \kappa_{N_g} \geq 0$ von MPW bezeichnet. Sind alle Singulärwerte κ_i von Null verschieden, läßt sich (5.90) nach $\underline{\beta}$ auflösen

$$(5.94) \quad \underline{\beta} = \underline{U} \underline{K}^{-1} \underline{V}_1^+ \underline{NPW} \underline{\alpha}, \quad \text{wenn} \quad \underline{V}_2^+ \underline{NPW} \underline{\alpha} = 0,$$

wobei $\underline{V}_1 := (\underline{v}_1, \dots, \underline{v}_{N_g})$ aus den N_g ersten und $\underline{V}_2 := (\underline{v}_{N_g+1}, \dots, \underline{v}_{N_g+\sigma})$ aus den σ letzten Spaltenvektoren der Matrix V besteht. Vermittels einer zweiten Singulärwertzerlegung

$$(5.95) \quad \underline{V}_2^+ \underline{NPW} = \underline{Z} (\underline{\delta}, \underline{0}) \underline{W}^+$$

(mit unitären Matrizen W und Z der Dimension 2σ bzw. σ und der Singulärwertmatrix $\underline{\delta} = \text{diag}(\delta_1, \dots, \delta_\sigma)$) erhält man eine Orthonormalbasis des Nullraumes der Matrix $\underline{V}_2^+ \underline{NPW}$ in Gestalt der σ letzten Spaltenvektoren $\underline{w}_{\sigma+1}, \dots, \underline{w}_{2\sigma} \in \mathbb{C}^{2\sigma}$ der Matrix W.

Damit ist der Raum der oberflächenadaptierten Volumenzustände hinreichend beschrieben: Die Koeffizientenmatrix $\underline{\alpha}$ (vgl. (4.11), (4.12) und (4.18)) ist gegeben durch

$$(5.96) \quad \underline{\alpha} = (\underline{\alpha}_+, \underline{\alpha}_-) = (w_{G+1}, \dots, w_{2G})^T .$$

Da ihre Zeilenvektoren nach Konstruktion orthonormal in $\mathbb{C}^{2G}$ sind, erfüllt sie die in Abschnitt 4.2 vorausgesetzten Bedingungen, sodaß aufgrund der unitären Invarianz der Matrix $\underline{A} = 2 \underline{\alpha}_+^\dagger \underline{\alpha}_-$ alle dort vollzogenen Überlegungen bei Verwendung der auf die hier angegebene Weise gewonnenen Matrix $\underline{\alpha}$ richtig bleiben.

Oberflächenzustände sind dadurch gekennzeichnet, daß Gl.(5.90) für $\underline{\alpha} = \underline{0}$ nichttriviale Lösungen $\underline{\beta}$ besitzt; dies ist genau dann der Fall, wenn mindestens einer der Singulärwerte κ_i von $\underline{MPW}$ verschwindet. Gilt

$$(5.97) \quad \kappa_{N_g} = \kappa_{N_g-1} = \dots = \kappa_{N_g-s+1} = 0 ,$$

so definieren die s letzten Spaltenvektoren $u_{N_g}, \dots, u_{N_g-s+1}$ der Matrix $\underline{U}$ in (5.93) eine Basis für den Lösungsraum der Koeffizienten $\underline{\beta}$ der Oberflächenzustände.

Zeigt die Energieabhängigkeit des kleinsten Singulärwertes $\kappa_{\min} = \kappa_{N_g}$ ein Minimum derart, daß zwar keine Nullstelle vorliegt, der Minimalwert aber doch deutlich kleiner ist als die anderen Singulärwerte, so dominiert auf der rechten Seite von (5.94) der Term

$$(5.98) \quad \underline{\beta}_{\text{res}} = \kappa_{\min}^{-1} u_{N_g} v_{N_g}^\dagger \underline{NPW} \underline{\alpha} .$$

Aufgrund der Kleinheit des Nenners $\kappa_{\min}$ ist die Amplitude der zugehörigen Wellenfunktion im Oberflächenbereich, verglichen mit der im Volumenbereich, stark erhöht; dies entspricht dem typischen Verhalten einer Oberflächenresonanz.

Die numerische Differenzierung zwischen Oberflächenzuständen und -resonanzen ist – im Unterschied zu anderen Verfahren (/23;/29;/35;/136;/24/) –

insofern unproblematisch, als der kleinste Singulärwert $\kappa_{\min}$ als Funktion der Energie in der Umgebung eines Oberflächenzustandes ein Verhalten wie

$$(5.99) \quad \kappa_{\min}(E) = |\lambda(E)|$$

zeigt, wobei $\lambda(E)$ bei der Energie E_j^{SS} des Oberflächenzustandes einen glatten Nulldurchgang hat (Fig. 5.2.a) ⁶⁴⁾, während die Energieabhängigkeit in der Nähe einer Oberflächenresonanz entweder parabolisch ist (Fig. 5.2.b) oder - beim Überschreiten eines Extremums E_V^H der reellen Bandstruktur (vgl. S.145) - den in Fig. 5.2.c gezeigten Verlauf aufweist.

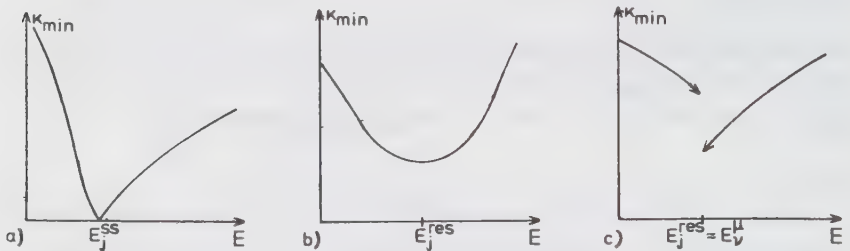


Fig. 5.2:

Verhalten des kleinsten Singulärwertes der Matching-Matrix in der Umgebung eines Oberflächenzustandes (a) und einer -resonanz (b,c).

Die gruppentheoretische Klassifikation der Halbraumzustände (vgl. Abschnitt 3.3.3) nimmt man zweckmäßigerweise anhand der Koeffizienten β vor, da die Wirkung der Operationen der "kleinen Gruppe" $\overline{O}_{K_k}$ (siehe (3.178)) auf β leicht zu ermitteln ist.

Anzumerken bleibt schließlich noch, daß sich bei spiegelsymmetrischen Volumeneinzelschichten und unter der Bedingung (3.48) die Matching-Matrix MPW auf rein reelle Form transformieren läßt. Dies beruht darauf, daß unter diesen Voraussetzungen die Orthogonalprojektoren $\underline{Q}_p$ und $\underline{Q}_{ev}$ (Gl.(5.82)) reell sind und sich auch die ONB $\underline{E} = (\underline{e}_1, \dots, \underline{e}_G)$ von $L_{ev}^\perp$ vermittels einer (reellen) Singulärwertzerlegung

64) Dies rührt daher, daß die Singulärwerte von MPW gerade die Eigenwerte von $|\underline{MPW}|$ sind (/61, Vol.I, p.204/).

$$(5.100) \quad (\operatorname{Re} \underline{\underline{E}}, \operatorname{Im} \underline{\underline{E}}) = \sum_{\nu=1}^m \underline{h}_{\nu} \varepsilon_{\nu} \underline{k}_{\nu}^T \quad (m := \min(2G, N_g))$$

($\varepsilon_1 \gg \varepsilon_2 \gg \dots$ Singulärwerte; $\{\underline{h}_{\nu}\} \subset \mathbb{R}^{N_g}$, $\{\underline{k}_{\nu}\} \subset \mathbb{R}^{2G}$ Orthonormalsysteme der links- und rechtsseitigen Singulärvektoren) durch das reelle ONS $\underline{H} := (\underline{h}_1, \dots, \underline{h}_G)$ ersetzen läßt; denn die reelle Gestalt von $\underline{Q}_p = \underline{\underline{E}} \cdot \underline{\underline{E}}^T$ impliziert

$$(5.101) \quad \underline{Q}_p = \sum_{\nu=1}^m \underline{h}_{\nu} \varepsilon_{\nu}^2 \underline{h}_{\nu}^T,$$

woraus man mit Hilfe der Projektoreigenschaft $\underline{Q}_p^2 = \underline{Q}_p$ und der Rangbedingung $\operatorname{rg}(\underline{Q}_p) = G$ sofort die Darstellung

$$(5.102) \quad \underline{Q}_p = \sum_{\nu=1}^G \underline{h}_{\nu} \underline{h}_{\nu}^T$$

ableiten kann.

6. Numerische Ergebnisse von Modellrechnungen an den Metallen Al und Cu

6.1 Das Modell für den Halbraum

Da die im folgenden beschriebenen numerischen Rechnungen in erster Linie dem Zwecke dienen sollten, die in dieser Arbeit entwickelte Methode anhand bekannter Beispiele zu demonstrieren und dabei auch mit anderen Verfahren zu vergleichen, wurde das einfache Modell des idealen Halbraumes zugrunde gelegt und auf die Berücksichtigung von Effekten, die für eine reale physikalische Kristalloberfläche charakteristisch sind, verzichtet. Im Hinblick auf eine Verifikation der theoretisch erarbeiteten Ergebnisse, vor allem der Konvergenz- und Stabilitätsaussagen, an einem konkreten System bedeutet dies jedoch ebenso wenig eine wesentliche Einschränkung wie der Umstand, daß auf einfache Modellpotentiale zurückgegriffen wurde, auf denen Rechnungen anderer Autoren basieren (sodaß deren Resultate auch quantitativ als Vergleichsdaten benutzt werden konnten).

6.1.1 Das Potential im Kristallinneren

Im Volumenbereich $z_V < z$ wurde eine strenge Muffin-Tin-Form des Potentials gemäß Gl.(5.55) angenommen, wobei der APW-Radius r_{APW} maximal (= halber Abstand zu den nächsten Nachbaratomen) gewählt wurde. Als in der Literatur häufig zu findende Standardmodelle bieten sich im Falle von Al das von Snow (/137/) ⁶⁵⁾ und im Falle von Cu das von Chodorow (/138/) und Burdick (/139/) angegebene Potential an. Beide haben sich für eine qualitative Interpretation und quantitative Erklärung sowohl von Volumen- als auch von Oberflächeneigenschaften der genannten Metalle als durchaus brauchbar erwiesen (/108;/115;/140;/35;/141;/13;/142/-/150/). Das auf recht einfache Weise konstruierte Burdick-Potential hat in neueren Arbeiten sogar insofern eine neuerliche Aufwertung erfahren, als sich die hieraus ergebenden Energiebänder mit experimentell (durch Photoemission oder inverser

65) Zur Vermeidung eventueller Mißverständnisse bei der Interpretation der von Snow tabellierten Stützwerte ist festzuhalten, daß der korrekte Wert des konstanten MT-Niveaus -0.831 Ry beträgt; vgl. /108,ref.18/.

Photoemission) gewonnenen Bandstrukturen in vergleichbarer (/151/) oder sogar besserer (/152/;/153/;/154/) Übereinstimmung befinden als jene, denen ein relativ aufwendig berechnetes selbstkonsistentes Potential (wie z.B. (/155/ oder /156/) zugrunde liegt.

6.1.2 Das Potential im Außenraum

Der Übergang des Potentials von der (idealen) Oberfläche $z = z_V$ zum Vakuumniveau V_{Vac} für $z \rightarrow -\infty$ wurde mittels der nur z -abhängigen analytisch gegebenen Funktion

$$(6.1) \quad V(z) = V_0 + (V_{Vac} - V_0) \tanh\left(\frac{\pi}{L}(z - z_w)\right)$$

simuliert. Die Position z_w des Wendepunktes und die Übergangslänge L wurden als Modellparameter betrachtet, während das Vakuumniveau V_{Vac} aus experimentellen Werten (/148/;/157/) für die Austrittsarbeit $\Phi = V_{Vac} - E_F$ der jeweiligen Oberfläche und der sich für das betreffende MT-Potential ergebenden Fermienergie E_F (/137/;/5/) bestimmt wurde. Die Konstante V_0 schließlich wurde durch die Forderung festgelegt, daß das Potential $V(z)$ an der Grenzfläche $z = z_V$ stetig an das Muffin-Tin-Niveau zwischen den MT-Kugeln anschließen soll.

Orientiert man sich am Jellium-Modell (/158/), so scheint ein derartig geformtes Potential für die Beschreibung des Außenraumes recht plausibel zu sein, weswegen es auch in anderen Arbeiten (/112/;/133/) zugrunde gelegt wurde. Durch Variation von z_w läßt sich der Abstand der die Elektronen an den kristallinen Halbraum bindenden Potentialbarriere verändern; die Länge $2L$ definiert die Ausdehnung des Bereiches, in dem der Anstieg vom MT-Niveau zum Vakuumniveau im wesentlichen erfolgt. Man kann daher erwarten, daß man mit diesen Parametern die energetische Lage von Oberflächenzuständen dann stark beeinflussen kann, wenn diese vornehmlich vom Verlauf des Potentials vor der Kristalloberfläche bestimmt wird.

Obleich für das Potential (6.1) die Lösungen der eindimensionalen Schrödingergleichung (3.160) in ihrer analytischen Form bekannt sind (/159/), erwies sich in der Praxis die numerische Integration der Differentialgleichung als zweckmäßiger (/134/).

6.2 Komplexe Bandstrukturen

6.2.1 Untersuchungen zur Konvergenz und Optimierung der freien Parameter des Verfahrens

Zur Untersuchung der Frage, wie sich die numerische Genauigkeit in Abhängigkeit von der Zahl der Basisfunktionen im Ansatz (5.5)/(5.8) und von den Werten der Parameter α und E_0 des Randoperators Λ und des Stetigkeitsparameters g im Variationsausdruck (5.1) quantitativ verhält, wurden verschiedene Tests durchgeführt.

Um durch das Kristallpotential verursachte Effekte abseparieren zu können, wurde dieses zunächst gleich Null gesetzt und ein Vergleich der numerisch gewonnenen Matrizen $\hat{M}$ (5.15) und $\underline{G}_{XY}$ (5.67) sowie der komplexen Bandstruktur $k_{\perp}^{(\nu)}(E, \vec{k}_a)$ mit den in diesem Fall auch analytisch darstellbaren exakten Größen vorgenommen ("Empty-Lattice-Test"). Die Resultate zeigen, daß für eine etwa sechsstellige Genauigkeit der reellen Bandstruktur und eine dementsprechende Genauigkeit der Matrixelemente von $\hat{M}$ bzw. $\underline{G}_{XY}$ (4 - 6 D) die Tschebyscheffentwicklung (5.9) bei $N \approx 17 - 20$ und die Drehimpulsdarstellung (5.5) bei $L \approx 9 - 10$ abgebrochen werden kann; letzteres deckt sich mit den beim APW-Verfahren üblichen Werten (/40,p.67;/160/). Da in diesem speziellen Fall die exakten Matrizen $\underline{G}_{XY}$ diagonal sind, ist die Zahl der planaren Fourierkoeffizienten für eine Genauigkeitsanalyse unerheblich, sofern nur alle $\vec{g}$ -Vektoren berücksichtigt sind, die zur Darstellung derjenigen reellen Energiebänder (5.71) erforderlich sind, die von der gegebenen Energie E geschnitten werden. Wesentlich ist daher allein, inwieweit die Nichtdiagonalelemente von $\underline{G}_{XY}$ gegen Null auskonvergieren sind, sodaß der "Empty-Lattice-Test" als spezifisch für die Konvergenz der Reihen (5.5) und (5.9) angesehen werden kann. Besondere Bedeutung kommt hierbei der Summenregel (5.43) zu; ist sie doch ein Maß dafür, wie gut die von der MT-Kugel "ausgestanzten" Teile der planaren ebenen Wellen durch eine Entwicklung nach Kugelwellen approximiert werden. Es zeigte sich, daß die Größe des Residuums von Gl.(5.43) unmittelbar mit der numerischen Genauigkeit der Matrizen $\underline{M}$ und $\underline{G}_{XY}$ korrespondiert, sodaß also die Konvergenz der L-Darstellung als ein wesentliches Kriterium zu betrachten ist.

In unmittelbarem Zusammenhang damit steht die Frage, wie der Stetigkeitsparameter $\mathcal{g}$ gewählt werden soll. Obgleich sich das Verfahren generell gegenüber einer moderaten Variation von $\mathcal{g}$ als recht unempfindlich erwies, war doch deutlich erkennbar, daß die spezielle Wahl

$$(6.2) \quad \mathcal{g} = r_0 \cdot L_{L+1}(E, r_0)$$

zu favorisieren ist. Der Grund hierfür ist, daß dadurch bei der l-Summation im letzten Term von Gl.(5.15) eine obere Summationsgrenze $L+1$ simuliert wird; in der Tat konnten z.B. die mit $\mathcal{g} = 0$ und $L = 10$ erhaltenen Näherungswerte für die reelle Bandstruktur im Rahmen der erzielten Rechengenauigkeit reproduziert werden, indem $\mathcal{g} = L_{10}$ und $L = 9$ gesetzt wurde.

Die Festlegung der den Randoperator $\mathcal{A}$ charakterisierenden Parameter α und E_0 ist ebenfalls unproblematisch, sofern die Positivität von $\mathcal{A}$ gewährleistet ist. Testrechnungen mit verschiedenen Werten von α ($0.5 \leq \alpha \leq 2.0$) und E_0 ($0.01 \text{ Ry} \leq E_0 \leq 1 \text{ Ry}$) lieferten für die komplexe Bandstruktur in einer weiten Umgebung der reellen $k_{\perp}$ -Achse identische Ergebnisse.

Alle bisherigen Feststellungen gelten auch für die anschließend unternommenen numerischen Untersuchungen an Aluminium und Kupfer, abgesehen davon, daß bei einem realen Kristallpotential der Konvergenz der planaren Fourierentwicklung (5.8) eine entscheidende Bedeutung zukommt. Zur Abschätzung der erzielten Rechengenauigkeit kann man zum einen die Änderung der Werte der Matrixelemente von G_{xy} und der komplexen Bandstruktur in Abhängigkeit von der Zahl der planaren Fourierkoeffizienten N_g als Kriterium nehmen, zum anderen aber auch einen direkten Vergleich mit der reellen Bandstruktur von Snow (/137/) im Falle von Al⁶⁶⁾ und mit der von Burdick (/139/) im Falle von Cu anstellen. Beides führt zu übereinstimmenden Resultaten:

Erstens ist der in Abschnitt 5.2.2 diskutierte Geometrieeffekt klar erkennbar; eine Toleranz von 1 mRy bei der reellen Bandstruktur in einem Energiebereich bis zu 3 Ry über der Fermienergie erfordert $N_g = 25 - 29$

66) Man beachte die Korrekturen von Greisen (/161/)!

bei Al(100), $N_g = 43 - 47$ bei Al(110) und $N_g = 45 - 49$ bei Cu(100), während bei Cu(110) mit $N_g \approx 50$ die Energiebänder noch in keiner Weise auskonvergieren sind. Das Verhältnis der N_g -Werte von Al(110) und Al(100) deckt sich in etwa mit dem hypothetischen Wert (reziprokes Abstandsverhältnis $d_{100}/d_{110} = 1.41$); unterstellt man dies auch im Falle von Cu, so ist bei Cu(110) eine Genauigkeit im mRy-Bereich erst für $N_g \approx 75 - 89$ zu erwarten.

Zum zweiten zeigt sich deutlich der unterschiedliche Charakter der Wellenfunktionen eines einfachen Metalles wie Al und eines Übergangsmetalles wie Cu im Energiebereich zwischen den Valenzbändern und den unteren Bändern der angeregten Zustände. So läßt sich bei ersteren die vornehmlich nur s- und p-artige Symmetrie aufweisende und nur mäßig variierende Ortsabhängigkeit nahe der Ionenrümpfe durch relativ wenige ebene Wellen im Außenbereich fortsetzen; die Bandstruktur ähnelt daher auch in starkem Maße der von nahezu freien Elektronen. Hingegen zeugen die flachen, in manchen $\vec{k}$ -Richtungen fast keine Dispersion zeigenden d-Bänder bei Cu von einer resonanzförmigen Ortsabhängigkeit der zugehörigen Wellenfunktionen, die nur durch relativ viele planare Fourierkoeffizienten zufriedenstellend beschrieben werden kann.

Um nachzuprüfen, ob das Verfahren auch bei räumlich stark lokalisierten elektronischen Zuständen zuverlässig arbeitet, wurden für einige hochsymmetrische $\vec{k}_n$ -Punkte die komplexen Bandstrukturen von Al(100) und Cu(100) im Bereich der 2s- und 2p- bzw. 3s- und 3p-Rumpfergien berechnet. Die fast völlig flachen Bänder der reellen Bandstruktur (siehe Fig. 6.1 - 6.3) konnten hierbei mit 0.1 mRy Toleranz problemlos gewonnen werden, ohne daß irgendwelche Instabilitäten beim Überschreiten der Resonanzenergien zu verzeichnen gewesen wären. Die "Konfidenzglocke" (5.73) umfaßt also in der Tat auch die Rump fzustände, womit gezeigt ist, daß auch die energetischen Bereiche tief "unter" der komplexen $k_\perp$ -Ebene, die bisher nur einen analytischen Zugang gestatteten ($/8;/9/$), einer numerischen Behandlung offen stehen.

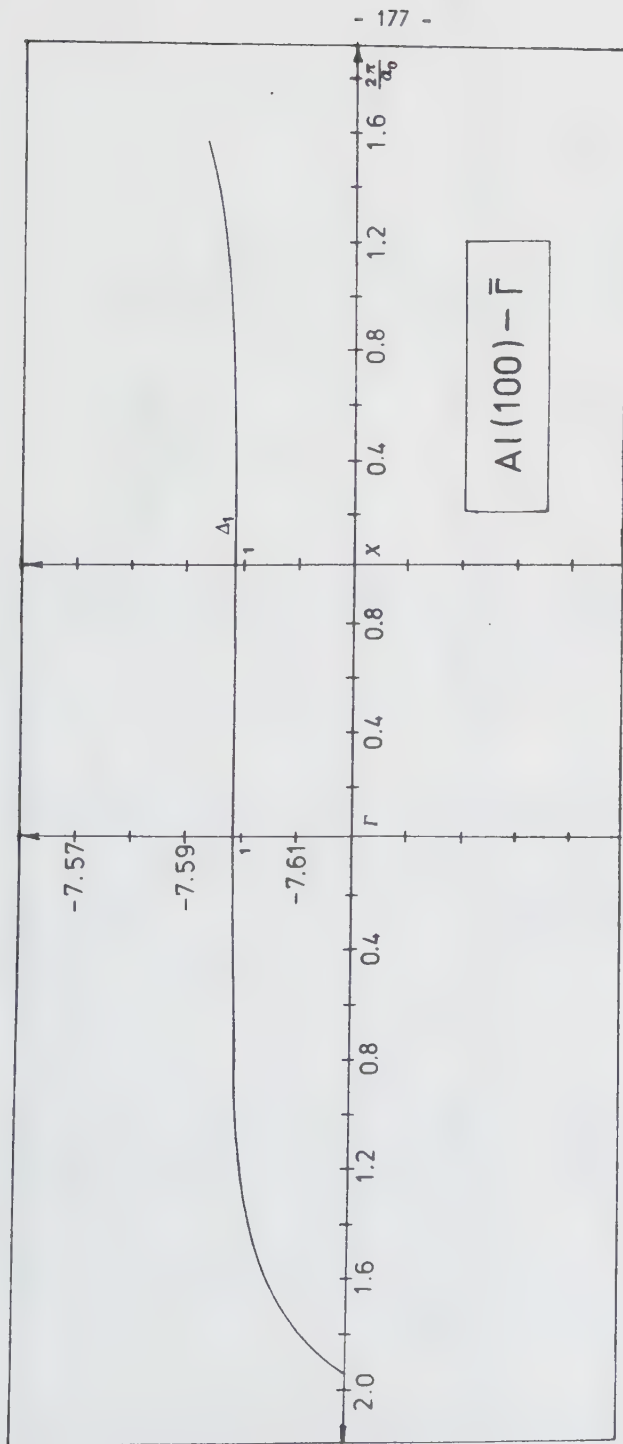


Fig. 6.1: Komplexe Bandstruktur in der Umgebung des 2s-Zustandes von Aluminium

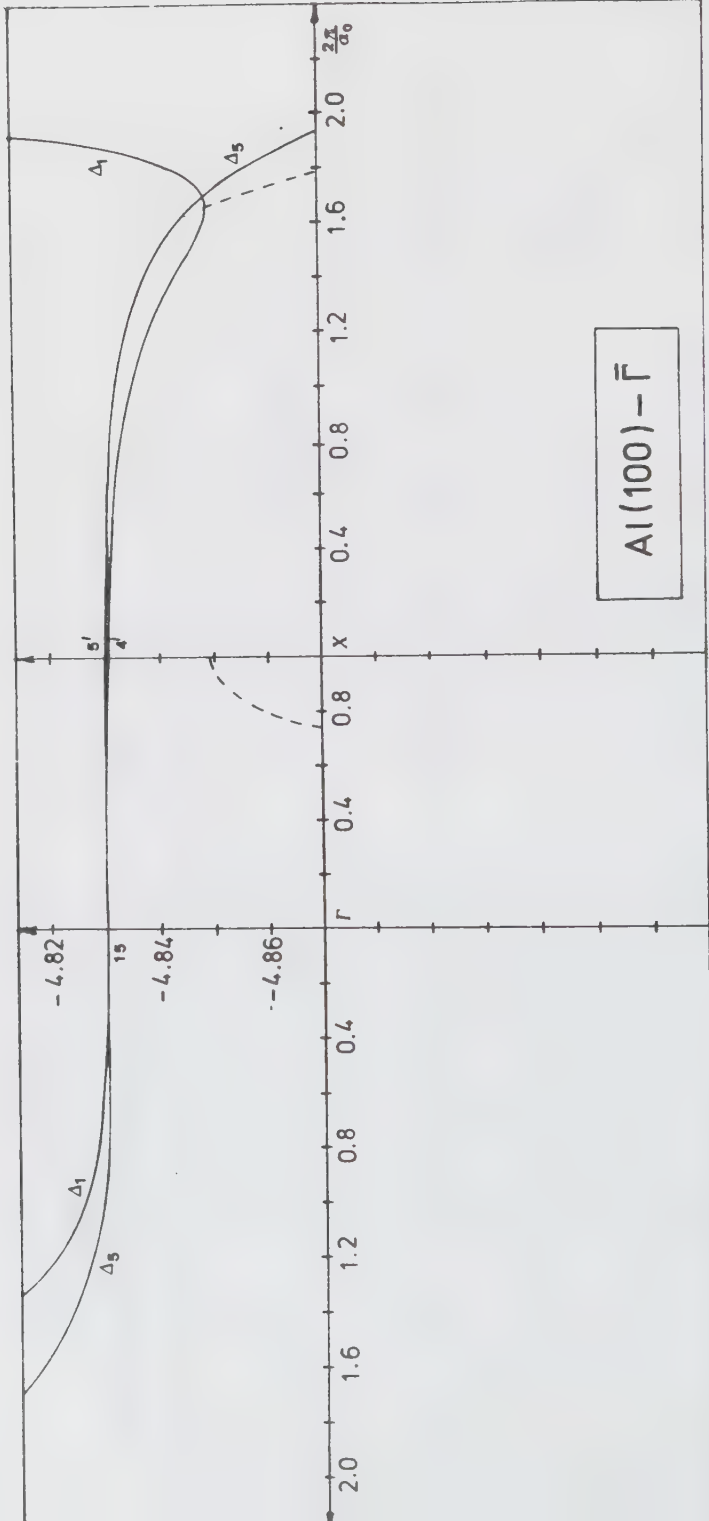


Fig. 6.2: Komplexe Bandstruktur in der Umgebung der 2p-Zustände von Aluminium

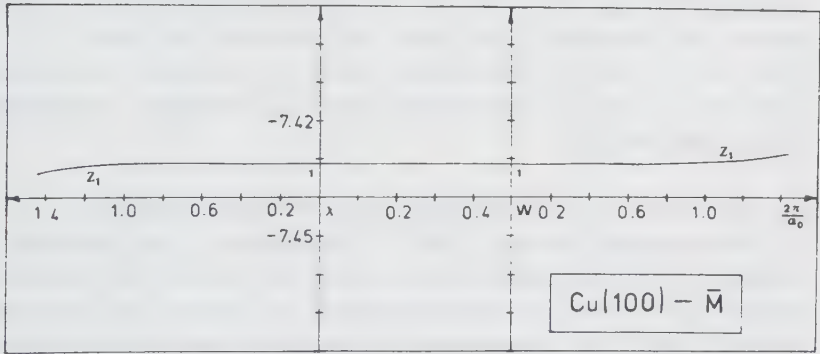
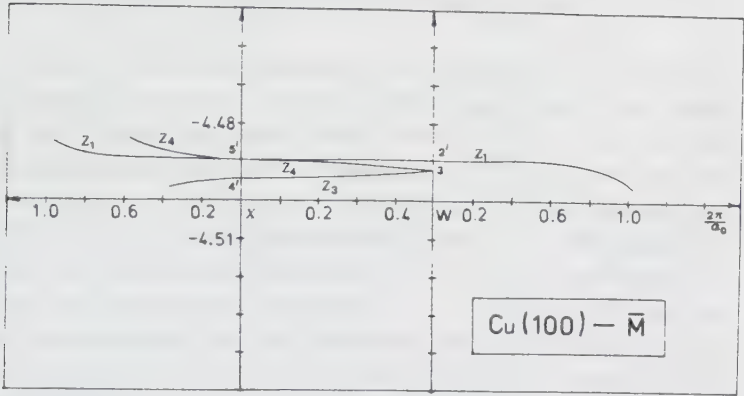


Fig. 6.3:
Komplexe Bandstruktur in der Umgebung der 3s- und 3p-Zustände
von Kupfer

6.2.2 Erläuterungen zu den berechneten komplexen Bandstrukturen

Eine graphische Darstellung der komplexen Bandstrukturen für alle hochsymmetrischen $\vec{k}_\perp$ -Punkte der Al(100)-, Al(110)- und Cu(100)-Fläche findet sich in Fig. 6.4 - 6.13. Der jeweils abgebildete Energiebereich erstreckt sich etwa von -2.3 Ry bis 3.5 Ry, bezogen auf das konstante MT-Niveau zwischen den MT-Kugeln als Energienullpunkt (-0.831 Ry bei Al bzw. -0.939 Ry bei Cu). Die Ausdehnung in der $k_\perp$ -Ebene beträgt $|\text{Im } k_\perp| \leq 1.8 - 2.3 (2\pi/a)$ (a = Gitterkonstante) und ist so gewählt, daß diejenigen reellen Linien, die den größten Abstand zur reellen $k_\perp$ -Achse aufweisen, etwa noch mit der halben Genauigkeit der reellen Bandstruktur zu bestimmen waren (d.h. von den $2N_g$ Eigenwerten $t_\perp^{(v)}$ wurde ungefähr die Hälfte unterdrückt). Die Abbildungen sind so zu verstehen, daß der mittlere Teil die reelle Bandstruktur längs einer irreduziblen Strecke im $\vec{k}$ -Raum senkrecht zur jeweils betrachteten Oberfläche darstellt, wie sie Fig. 3.1.a, b zu entnehmen ist. Die Seitenteile hat man sich um 90° aus der Zeichenebene herausgedreht vorzustellen; sie entsprechen einem Schnitt der komplexen Bandstruktur mit Ebenen $\text{Re } k_\perp = \text{constans}$. Gestrichelte Linien sind als Aufriß bzw. Seitenriß von reellen Linien zu interpretieren, die nicht in einer der gezeichneten Ebenen enthalten sind.

Die niederenergetischen Bereiche der reellen Bandstrukturen decken sich mit den Ergebnissen von Snow (/137/) ⁶⁶⁾ und Burdick (/139/) innerhalb der jeweiligen Rechengenauigkeit (ein bis einige mRy); mit den vorliegenden Rechnungen wird (nach Kenntnis des Autors bei der Mehrzahl der Oberflächen zum ersten Male) eine systematische Fortsetzung in Gebiete relativ hoher und tiefer Energien und ins Komplexe mit gesicherten Rechentoleranzen geleistet und somit ein globaler Überblick über die Zusammenhangsverhältnisse innerhalb eines Systems reeller Linien ermöglicht. Die dargestellten komplexen Bandstrukturen zeigen exemplarisch die (in den Abschnitten 2.4.2, 3.1.1 und 3.1.2 zitierten) theoretisch prognostizierten Eigenschaften. Man beachte insbesondere, daß in der Tat nur Singularitäten vom Wurzeltyp zu beobachten sind und daß in der Umgebung eines Sattelpunktes, wo sich vier reelle Linien treffen, die Krümmungen der Kurven sich im Kleinen stets so verhalten, wie es die Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen erwarten lassen; die Detailzeichnungen Fig. 6.14 - 6.16 illustrieren dies recht eindrucksvoll (man achte auf den Maßstab!).

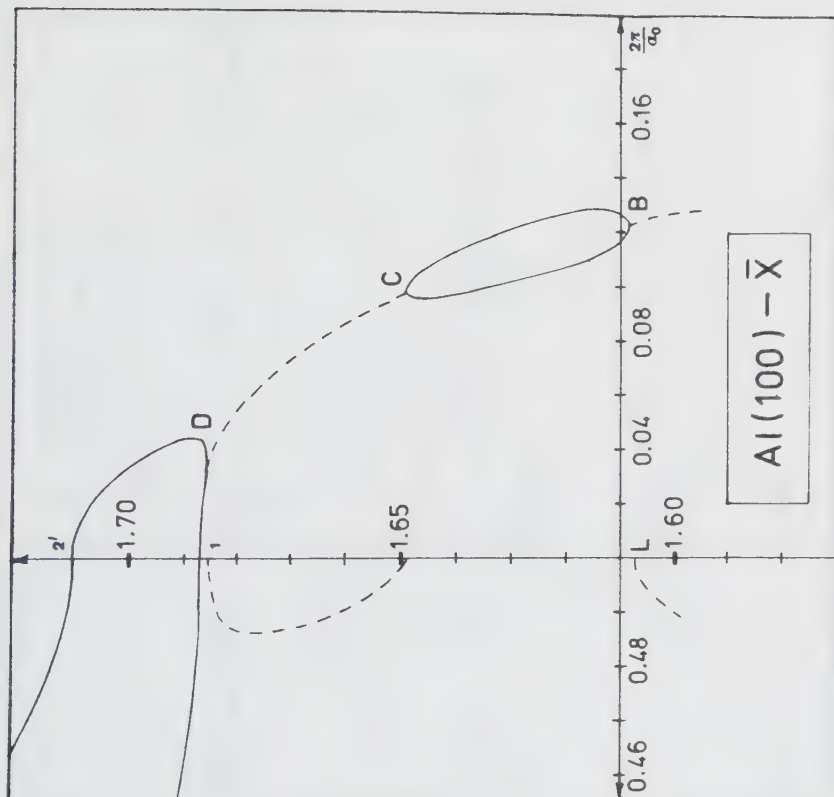


Fig. 6.14:
Ausschnittsvergrößerung zu Fig. 6.5

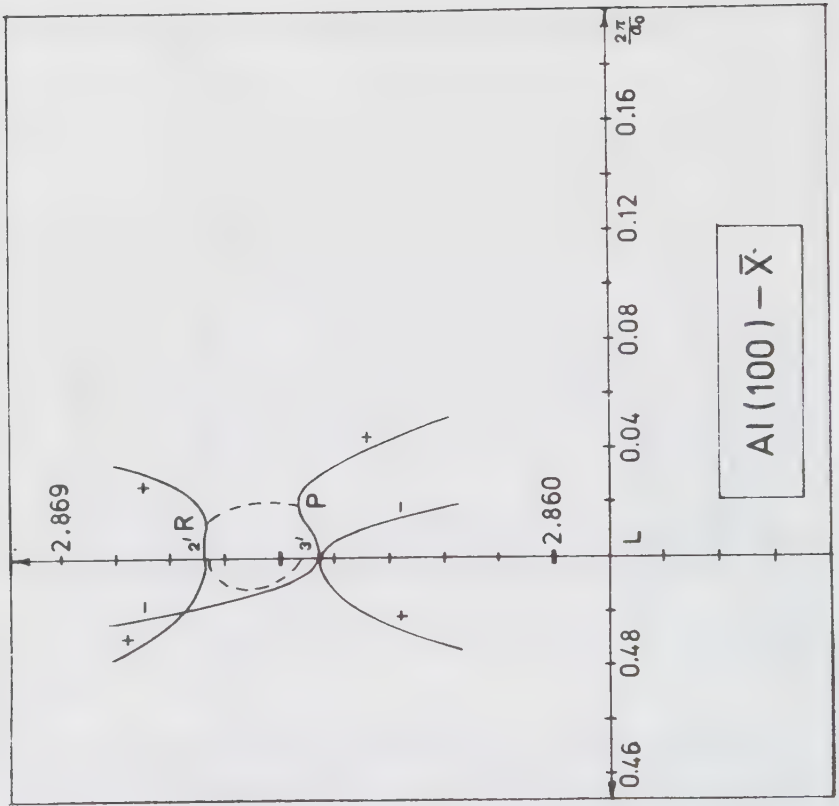


Fig. 6.15:
Ausschnittsvergrößerung zu Fig. 6.5

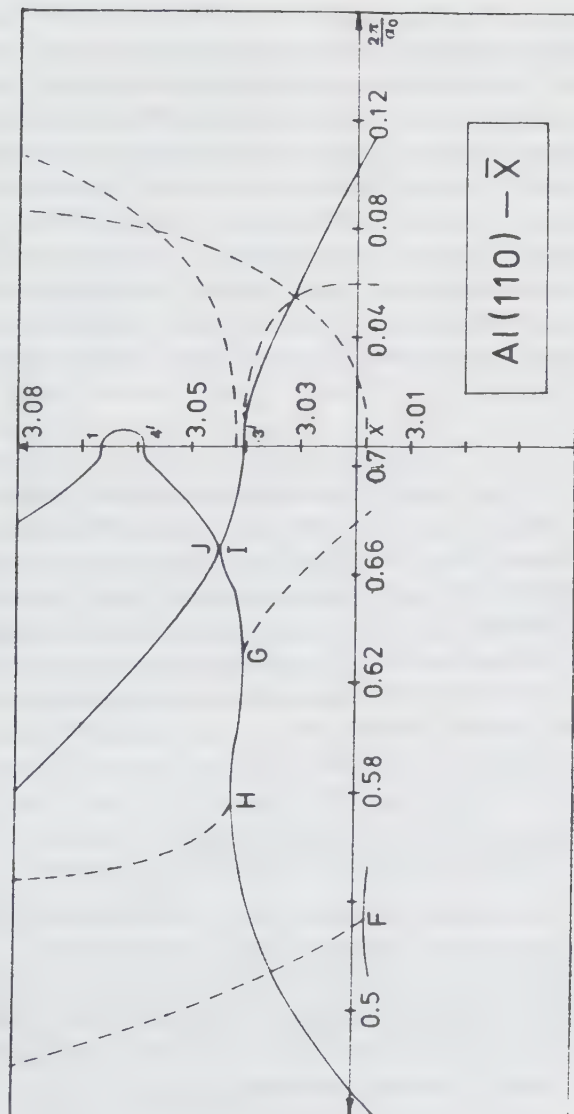


Fig. 6.16: Ausschnittsvergrößerung zu Fig. 6.8

Beim Vergleich der komplexen Bandstrukturen von Al (Fig. 6.4 - 6.10) mit denen von Cu (Fig. 6.11 - 6.13) im Bereich um die Fermienergie ($E_F = 0.602$ Ry bei Al; $E_F = 0.561$ Ry bei Cu) fällt vor allem die durch das Vorhandensein der d-Bänder bedingte größere strukturelle Reichhaltigkeit der reellen Linien von Cu auf, im speziellen die "schräge" Schleife B-C bei Cu(100)- $\overline{\Gamma}$, die sehr flache, das Fermi-niveau schneidende Linie A-B bei Cu(100)- $\overline{X}$ und die über der $k_{\perp}$ -Ebene geschlossene Schleife C-D bei Cu(100)- $\overline{M}$, die über die Linien B-C und D-E mit dem System der Z_1 -Linien am X-Punkt verbunden ist. Diesen und auch den senkrechten "Standardschleifen" wie z.B. Σ_1 - Σ_3 oder L_3 - L_2 bei Cu(100)- $\overline{X}$ ist gemeinsam, daß sie sich - verglichen mit Al - recht weit ins Komplexe ausdehnen, weshalb man bei Cu auch die Bildung von Oberflächenzuständen erwarten kann, die einen relativ schnellen exponentiellen Abfall ins Kristallinnere zeigen ($|\text{Im } k_{\perp}| \leq 0.1 - 0.3 (2\pi/a)$).

Hingegen liegen die d-artigen Zustände von Al bei so hohen Energien, daß die Bandstruktur bis weit über die Fermienergie die für die Energiebänder nahezu freier Elektronen charakteristische Gestalt besitzt. Daher treten in diesem Energiebereich fast ausschließlich senkrechte Schleifen auf, abgesehen von den unscheinbaren "schrägen" Spangen A-B, die die durch Hybridisierung bedingte kleine relative Bandlücke bei Al(110)- $\overline{\Gamma}$ und Al(110)- $\overline{X}$ überbrücken. Aufgrund der geringen Breite auch der absoluten Bandlücken erstrecken sich alle komplexen Schleifen nur sehr wenig in die $k_{\perp}$ -Ebene hinein ($|\text{Im } k_{\perp}| \leq 0.01 - 0.05 (2\pi/a)$), was ein dementsprechend langsames Abklingen der Oberflächenzustände im Kristall impliziert.

6.2.3 Kritischer Vergleich mit dem CMAPW-Verfahren

Die Idee, an die ursprüngliche Definition der komplexen Bandstruktur in Abschnitt 3.1.1 anknüpfend zu gegebenem $\vec{k} \in \text{BZ}_1^C$ die Eigenwerte $\varepsilon_j(\vec{k})$ des Operators $\hat{H}_{\vec{k}}$ zu bestimmen, ist numerisch in Form der Verallgemeinerung des MAPW-Verfahrens (/162;/163/) für komplexe $\vec{k}$ -Vektoren (CMAPW; siehe /164;/165;/36;/166/) realisiert worden. Da dem Autor eine Reihe von Daten zur Verfügung stand, die mit Hilfe dieser Methode gewonnen worden waren (/165/;

/134;/167/), lag ein Vergleich mit den eigenen Ergebnissen nahe. Dabei zeigte sich im Bereich um das Fermi-niveau und darunter bei der reellen Bandstruktur eine sehr gute Übereinstimmung, für $\vec{k}$ -Vektoren mit $|\text{Im } k_{\perp}| \geq 0.8 - 1.3 (2\pi/a)$ traten jedoch stellenweise erhebliche Diskrepanzen nicht nur quantitativer, sondern auch qualitativer Art insofern auf, als die mit dem CMAPW-Verfahren berechneten reellen Linien zum Teil völlig andere Zusammenhangsverhältnisse aufweisen; bei höher gelegenen Energien ($> 3 \text{ Ry}$) ist dies auch bei den komplexen Schleifen nahe der reellen Bandstruktur der Fall. Besonders auffällig ist hierbei das Phänomen, daß die auf diesem Verfahren basierenden komplexen Bandstrukturen zusätzliche, weitgehend fast senkrechte reelle Linien mit atypischer Steigung und Krümmung enthalten ("Geister"), durch deren Existenz die in dieser Arbeit dargestellten reellen Linien stark verbogen werden oder sogar hybridisieren, sofern dies aufgrund der jeweils vorliegenden Symmetrie möglich ist.

Eine eingehende numerische Analyse ergab, daß die unterschiedlichen Ergebnisse im Bereich höherer Energien nahe der reellen Bandstruktur auf einer Überschätzung der Genauigkeit des (reellen) MAPW-Verfahrens bei den zugrunde gelegten Verfahrensparametern beruhte. Nachdem diese für den betrachteten Energiebereich optimiert worden waren, konnten die vordem (oft um bis zu 100 mRy) zu hoch liegenden Energiebänder wenigstens soweit abgesenkt werden, daß bezüglich der Zusammenhangsverhältnisse Übereinstimmung erzielt wurde. An der Situation in den von der reellen $k_{\perp}$ -Achse entfernteren Gebieten änderte dies freilich wenig; durch Variation der Parameter des CMAPW-Verfahrens ließ sich allenfalls der Abstand der polartigen "Geisterlinien" zur reellen Bandstruktur bis zu einem gewissen Grad ($|\text{Im } k_{\perp}| \geq 1.8 (2\pi/a)$) vergrößern, ohne daß sie aber zum Verschwinden gebracht hätten werden können.

Eine mögliche Erklärung für diesen Sachverhalt kann man darin finden, daß die approximativen Energiebänder $\varepsilon_j(\vec{k})$ beim CMAPW-Verfahren durch Lösen eines allgemeinen algebraischen Eigenwertproblems der Form

$$(6.3) \quad \underline{H}(\vec{k}) \underline{x} = \varepsilon(\vec{k}) \cdot \underline{S}(\vec{k}) \underline{x}$$

gewonnen werden, bei dem die Überlappmatrix $\underline{S}(\vec{k})$ nur für reelle $\vec{k}$ -Vektoren hermitesch und positiv definit ist, während sie für echt komplexe $\vec{k}$ -Werte eine allgemeine (u.U. allenfalls noch komplex-symmetrische) Matrix darstellt, die bei bestimmten $k_{\perp}$ -Werten auch singular werden kann. In der Umgebung solcher Punkte der $k_{\perp}$ -Ebene kann $|\varepsilon_j(\vec{k}, k_{\perp})|$ beliebig groß werden und bei der komplexen Bandstruktur ein Verhalten der oben genannten Art hervorrufen. In der Tat ließ sich durch eine Untersuchung der $k_{\perp}$ -Abhängigkeit des Spektrums der Matrix $\underline{S}(\vec{k})$ das Auftreten von "Geisterlinien" stets mit dem Nulldurchgang eines Eigenwertes $\mu_j(\vec{k})$ von $\underline{S}(\vec{k})$ korrelieren.

Die entscheidende Frage ist somit, ob und wo die Eigenwerte $\mu_j(\vec{k})$ Nullstellen besitzen. Sicherlich sind alle Eigenwerte längs der reellen $k_{\perp}$ -Achse strikt positiv, und da $\underline{S}(\vec{k})$ holomorph von $k_{\perp}$ abhängt, ist dies aus Gründen der Stetigkeit auch in einer komplexen Umgebung davon der Fall. Gerade aber aufgrund der holomorphen $k_{\perp}$ -Abhängigkeit der Überlappmatrix ist andererseits im allgemeinen die Existenz von Nullstellen bei den Eigenwerten $\mu_j(\vec{k})$ zu erwarten (/62, ch.2/). Unter der plausiblen Annahme, daß die Lage der Nullstelle mit dem geringsten Abstand zur reellen $k_{\perp}$ -Achse desto weiter in die $k_{\perp}$ -Ebene rückt, je größer der Betrag des kleinsten Eigenwertes von $\underline{S}$ für reelle $k_{\perp}$ ist, erklärt sich dann auch die Beobachtung, daß eine durch Parameteroptimierung erzielte Konditionsverbesserung der $\underline{S}$ -Matrix die "Geisterlinien" weiter von der reellen Bandstruktur wegdrängt.

Wenngleich also das CMAPW-Verfahren nahe der reellen $k_{\perp}$ -Achse zufriedenstellende Resultate liefert, ist es doch mangels einer A-priori-Abschätzung, für welchen minimalen Wert von $|\text{Im } k_{\perp}|$ die Determinante von $\underline{S}$ ihren ersten Nulldurchgang hat, nur mit großer Sorgfalt und Vorsicht anzuwenden.

6.3 Oberflächenzustände

6.3.1 Untersuchungen zur numerischen Lokalisierbarkeit und zur Abhängigkeit vom Außenraumpotential

Der in Abschnitt 5.3 beschriebenen Vorgehensweise folgend wurden an den hochsymmetrischen $\vec{k}_n$ -Punkten der (100)-Fläche von Al und Cu ($\bar{\Gamma}$, $\bar{X}$, $\bar{M}$) die Energieniveaus von Oberflächenzuständen numerisch lokalisiert, indem innerhalb der interessierenden absoluten oder relativen Bandlücken der projizierten Bandstruktur längs eines (der Komplexität der reellen Linien entsprechend) geeignet gewählten Energierasters ($\Delta E \approx 0.2 - 5$ mRy) der kleinste Singulärwert $\kappa_{\min}(E)$ der "Matching-Matrix" MPW (5.91) bestimmt wurde. Das Auffinden der für einen Oberflächenzustand charakteristischen "Spitzen" (vgl. Fig. 5.2.a) erwies sich als völlig problemlos; selbst auf einem groben $\kappa_{\min}$ -E-Druckerplot ließ sich ein Oberflächenzustand auf graphischem Wege mühelos identifizieren und deutlich von einer Oberflächenresonanz (Fig. 5.2.b,c) unterscheiden, ohne daß hierzu noch eine Interpolation der Stützwerte erforderlich gewesen wäre. Auch die anhand der Komponenten des zu $\kappa_{\min}$ gehörenden rechtsseitigen Singulärvektors $\beta = u$ (vgl. (5.93) ff.) a posteriori vorgenommene gruppentheoretische Klassifikation bereitete keinerlei Schwierigkeiten.

Durch Variation der Position z_w des Wendepunktes und der Übergangslänge L des Potentials im Außenraum (6.1) wurde untersucht, in welchem Maße die energetische Lage der Oberflächenzustände und -resonanzen durch eine Änderung der Form des Potentials vor der Halbraumboberfläche zu beeinflussen ist. Wie bereits wohlbekannte einfache (analytische) Modellrechnungen (/6;/168;/77;/10;/11;/12;/169/) vermuten lassen, reagieren die betrachteten Zustände mit sehr unterschiedlicher Empfindlichkeit: So variiert für $-2 \leq z_w \leq 0$ und $10^{-3} \leq L \leq \pi$ (atomare Einheiten) der $\bar{M}_3$ -Zustand an der Cu(100)-Oberfläche (siehe Fig. 6.18) nur um 1 mRy, während der $\bar{\Gamma}_1$ -Zustand in der absoluten Bandlücke zwischen X'_4 und X_1 um nahezu 100 mRy zu höheren Energien "verschoben" werden kann, indem man die Potentialbarriere näher an die Kristalloberfläche rückt und möglichst steil macht.

Unterstellt man, daß die Argumente der zitierten Autoren auch auf allgemeinere Fälle übertragbar sind, bietet sich hierfür folgende anschauliche Interpretation an: Wesentlich für das Auftreten eines Oberflächenzustandes ist die Gleichheit der links- und rechtsseitigen Grenzwerte der logarithmischen Ableitungen der planaren Fourierkoeffizienten der Wellenfunktion an der Ebene $z = z_V$; dies läßt sich auch direkt aus der Definition der Matrix MPW (5.91) ableiten. Die Wahrscheinlichkeit, daß diese Bedingung erfüllt werden kann, ist dann groß, wenn sich einer der beiden Grenzwerte stark mit der Energie ändert. Für die logarithmische Ableitung auf der Seite des kristallinen Halbraumes ist dies zum einen innerhalb einer (hinreichend schmalen) Bandlücke der Fall (/168;/170/), zum anderen, wenn eine reelle Linie der komplexen Bandstruktur, aus relativ großer Entfernung aus dem Komplexen kommend, fast waagrecht in ein flaches Band über der reellen k_1 -Achse einmündet (wie z.B. das Z_2 -Band bei Cu(100)- $\overline{M}$; siehe Fig. 6.13). Oberflächenzustände dieser Art sind also unmittelbar an die Volumeneigenschaften des Halbraumes gekoppelt und weitgehend unabhängig von der genauen Gestalt des sie an den Kristall bindenden Potentialwalls ('crystal-induced surface states'; /169/). Beispiele hierfür sind der $\overline{T}_1$ -, $\overline{X}_3$ - und $\overline{M}_4$ -Zustand von Al(100) (Fig. 6.17) sowie die Oberflächenzustände von Cu(100) unterhalb der Fermienergie (Fig. 6.18).

Die logarithmische Ableitung auf der Vakuumseite zeigt eine umso größere Veränderlichkeit mit der Energie, je mehr sich diese dem Vakuumniveau nähert (/169/); bei festgehaltener Energie variiert sie darüberhinaus stark mit den Potentialparametern z_w und L . Damit erklärt sich nicht nur das Zustandekommen von Oberflächenzuständen in Energiebereichen, wo sich die logarithmische Ableitung auf der Kristallseite nur langsam ändert, sondern auch deren große Empfindlichkeit auf den Potentialverlauf im Vakuumbereich ('barrier induced surface states'). Der $\overline{T}_1$ - und der $\overline{X}_1$ -Zustand der Cu(100)-Fläche oberhalb der Fermienergie sind von dieser Art.

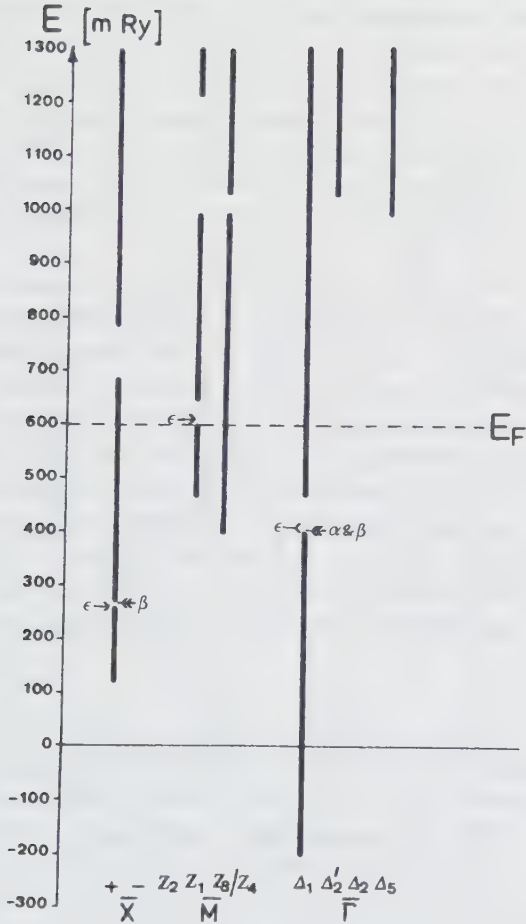


Fig. 6.17: Oberflächenzustände bei Al(100)

Theoretische Werte sind mit $\epsilon \leftarrow$ für den kleineren und mit $\epsilon \rightarrow$ für den größeren Index der irreduziblen Darstellung bezeichnet.

Experimentelle Werte: α = Gartland & Slagsvold (/141/) und
Hansson & Flodström (/171/)

β = Levinson et al. (/172/)

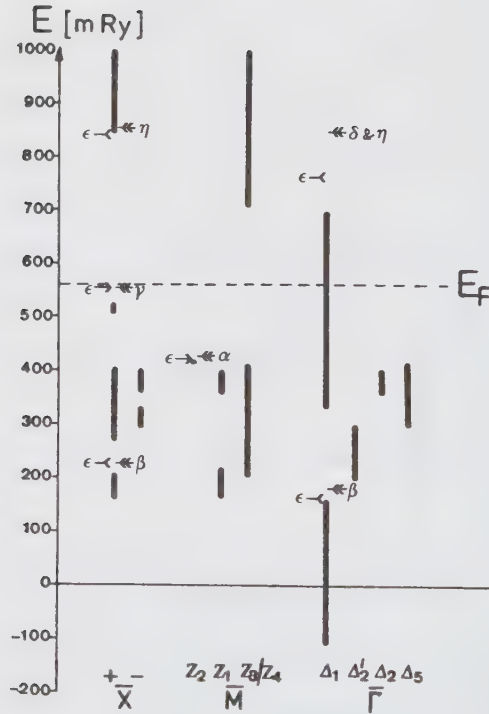


Fig. 6.18: Oberflächenzustände bei Cu(100)

Theoretische Werte sind mit $\epsilon \leftarrow$ für den kleineren und mit $\epsilon \rightarrow$ für den größeren Index der irreduziblen Darstellung bezeichnet.

Experimentelle Werte: α = Heimann et al. (/145/)

β = Westphal & Goldmann (/148/)

γ = Kevan (/173/)

δ = Straub & Himpsel (/179/)

η = Dose et al. (/150/)

6.3.2 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen

Nachdem sowohl für Al wie auch für Cu besetzte und neuerdings auch unbesetzte Oberflächenzustände und -resonanzen experimentell nachgewiesen werden konnten, wurde auch untersucht, ob und inwieweit durch eine geeignete Wahl der Potentialparameter z_w und L die eigenen Resultate an die experimentell gewonnenen angepaßt werden können. Die erzielten Ergebnisse sind in Fig. 6.17 und 6.18 in der Weise dargestellt, daß in die (nach Symmetrien aufgelöste) projizierte Bandstruktur über den Punkten $\bar{\Gamma}$, $\bar{X}$ und $\bar{M}$ die jeweiligen Energieniveaus eingetragen sind.

Im Falle von Al kennt man einen Oberflächenzustand bei $\bar{\Gamma}$ etwa 2.75 - 2.80 eV unterhalb der Fermienergie, der sich zunächst längs der $\bar{\Gamma}\bar{X}$ -Richtung weiter verfolgen läßt und der sich dann als Resonanz im Energiekontinuum bis $\bar{X}$ fortsetzt (/141/; /171/), möglicherweise aber auch in der dort existierenden schmalen Bandlücke wieder als Oberflächenzustand auftaucht (/172/). Wählt man $z_w = 0$ und $L \approx 0.5$ a.u., so liefert die eigene Rechnung einen $\bar{\Gamma}_1$ -Zustand etwa 10 mRy über dem gemessenen Wert und einen $\bar{X}_3$ -Zustand knapp über der Bandkante bei L_2 . Für einen etwas flacheren Potentialwall ($L = 1.0$ a.u.) rutscht letzterer als Resonanz ins Kontinuum unter L_2 , während sich der erstere bis auf 5 mRy dem experimentellen Wert nähert. In der Theorie zeigt sich ferner ein unbesetzter Oberflächenzustand ($\bar{M}_4$) etwa 10 mRy über E_F .

Bei Cu wurde eine Vielfalt von Oberflächenzuständen entdeckt, die für jeden der von den Theoretikern in den dreissiger Jahren behandelten "klassischen" Fälle ein Musterbeispiel beinhaltet, so den in der Hybridisierungsschleife B-C von Cu(100)- $\bar{\Gamma}$ (Fig. 6.11) bei etwa 184 mRy gemessenen Shockley-Zustand (/148/) oder den knapp über dem flachen Z_2 -Band bei etwa 425 mRy beobachteten Tamm-Zustand (/145/), der bereits im letzten Abschnitt erwähnt wurde. Des weiteren sind bei $\bar{X}$ zwei besetzte Oberflächenzustände bei etwa 226 mRy (/148/) und (4 mRy unterhalb des Fermi-niveaus) bei 557 mRy (/173/) bekannt sowie eine Resonanz unmittelbar an der Bandkannte (L_1) über der Fermienergie (/150/). Schließlich wurde von einem unbesetzten Oberflächenzustand bei etwa 850 mRy am $\bar{\Gamma}$ -Punkt berichtet (/174/; /179/; /150/).

Überraschenderweise konnte dieses experimentelle Spektrum von Oberflächenzuständen nicht nur qualitativ, sondern - abgesehen vom zuletzt genannten $\bar{\Gamma}_1$ -Zustand - auch quantitativ im Rahmen des hier zugrunde gelegten Halbraummodells reproduziert werden. Eine Potentialbarriere mit $z_w = 0$ und $L \approx 0.2$ a.u. führt zu einem Unterschied zwischen gemessenen und gerechneten Energieniveaus von 2 - 12 mRy. Allein bei dem innerhalb der 400 mRy hohen komplexen Schleife $X_4' - X_1$ (Fig. 6.11) plazierten unbesetzten $\bar{\Gamma}_1$ -Zustand läßt sich der theoretische Wert zwar mit z_w und L stark beeinflussen, doch weicht er um wenigstens 90 mRy nach unten vom experimentellen Ergebnis ab ⁶⁷⁾.

Dieses Resultat legt den Schluß nahe, daß für eine adäquate Beschreibung kristallinduzierter Oberflächenzustände nicht - wie bisweilen behauptet (/175/) - in erster Linie die Selbstkonsistenz des Elektronenpotentials im Oberflächenbereich entscheidend ist ⁶⁸⁾; viel wesentlicher scheint zu sein, daß im Kristallinneren ein Potential zugrunde gelegt wird, welches die Volumeneigenschaften richtig wiedergibt, und vor allem, daß von einem physikalisch und mathematisch sinnvollen Modell ausgegangen wird. Erst wenn die vom kristallinen Substrat bestimmten Oberflächeneigenschaften theoretisch beherrscht werden, sollte man an die selbstkonsistente Behandlung von Effekten gehen, für die der genaue Potentialverlauf im Oberflächen- und Vakuumbereich maßgeblich ist. Man kann nur vermuten, daß die zum Teil doch recht erheblichen Diskrepanzen, die bei einigen auf anderen Modellen und Verfahren basierenden Oberflächenzustandsrechnungen (/176;/ /35;/ /29;/ /177;/ /178;/ /136;/ /24/) sowohl untereinander als auch im Vergleich mit den experimentellen Daten bestehen, darauf zurückzuführen sind, daß diesem Sachverhalt eine zu geringe Bedeutung beigemessen wurde.

67) Dies deckt sich mit den Beobachtungen bei Dose et al. (/150/).

68) Eine ähnliche These wurde bereits von Bullett (/21/) vertreten.

Anhang 1: Beweis der Friedrichschen Ungleichung (2.32)

Sei $\vec{k}_n \neq \vec{0}$. Für das Gitter $G_2 = \mathbb{Z}\vec{a}_1 \oplus \mathbb{Z}\vec{a}_2$ sei zunächst die spezielle Elementarzelle $Z = (0,1)\vec{a}_1 + (0,1)\vec{a}_2$ gewählt; weiter sei $u \in \mathcal{C}^1(\bar{Z})$, $\partial_n^\alpha u_0 = t_1^\alpha u_1$ auf Γ_1 ($\alpha=0,1$). O.B.d.A. sei $\vec{k}_n \vec{a}_1 \neq 0 \pmod{2\pi}$.

Wir setzen $\vec{T}_j = \vec{a}_j$ ($j=1,2$) (siehe Fig. A.1.1)

und $t_1 := t|_{\Gamma_{1,1}} = e^{i\vec{k}_n \vec{T}_1} \neq 1$.

Für $\vec{r}_n \in Z$ schneidet die Gerade $\vec{r}_n + \mathbb{R}\vec{a}_1$ die Randstücke $\Gamma_{1,j}$ in den Punkten $\vec{r}_n^j$;

die Strecke von $\vec{r}_n^j$ nach $\vec{r}_n$ sei $\Sigma(\vec{r}_n^j, \vec{r}_n)$.

Mit $\vec{T} := \vec{a}_1/|\vec{a}_1|$ gilt:

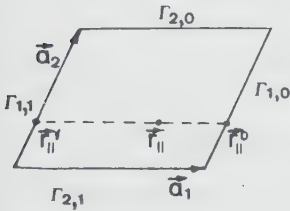


Fig. A.1.1

$$(A.1.1) \quad u(\vec{r}_n) = u(\vec{r}_n^1) + \int_{\Sigma(\vec{r}_n^1, \vec{r}_n)} (\vec{T} \vec{\nabla} u) ds$$

$$(A.1.2) \quad u(\vec{r}_n) = u(\vec{r}_n^0) - \int_{\Sigma(\vec{r}_n^0, \vec{r}_n)} (\vec{T} \vec{\nabla} u) ds$$

Wegen $u(\vec{r}_n^0) = t_1 u(\vec{r}_n^1)$ folgt

$$(A.1.3) \quad u(\vec{r}_n)(t_1 - 1) = t_1 \cdot \int_{\Sigma(\vec{r}_n^1, \vec{r}_n)} (\vec{T} \vec{\nabla} u) ds + \int_{\Sigma(\vec{r}_n^0, \vec{r}_n)} (\vec{T} \vec{\nabla} u) ds,$$

hieraus

$$(A.1.4) \quad |u(\vec{r}_n)| |t_1 - 1| \leq \int_{\Sigma(\vec{r}_n^1, \vec{r}_n)} |\vec{T} \vec{\nabla} u| ds + \int_{\Sigma(\vec{r}_n^0, \vec{r}_n)} |\vec{T} \vec{\nabla} u| ds = \int_{\Sigma(\vec{r}_n^1, \vec{r}_n^0)} |\vec{T} \vec{\nabla} u| ds$$

Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung schließt man:

$$(A.1.5) \quad |u(\vec{r}_n)|^2 \leq |t_1 - 1|^{-2} |\vec{a}_1| \int_{\Sigma(\vec{r}_n^1, \vec{r}_n^0)} |\vec{\nabla} u|^2 ds,$$

woraus folgt:

$$(A.1.6) \quad \int_Z |u|^2 d^2 r_n \leq \frac{|\vec{a}_1|^2}{|t_1 - 1|^2} \int_Z |\vec{\nabla} u|^2 d^2 r_n.$$

Ist $\hat{Z}$ eine beliebige Elementarzelle, so setzen wir u und $\vec{\nabla}u$ vermöge der Blochbedingung (2.4) auf ganz $\mathbb{R}^2$ stetig fort; dann wählen wir das oben eingeführte Parallelogramm Z als neue Elementarzelle. Da die auftretenden Integrale auf jeder Elementarzelle denselben Wert annehmen, bleibt die Aussage (A.1.6) auch für $\hat{Z}$ richtig.

Anhang 2: Charakterisierung des energetischen Raumes $H_t^{(1)}(Z)$

Es ist nach Definition

$$(A.2.1) \quad H_t^{(1)}(Z) := \overline{\{u \in \mathcal{C}^2(\bar{Z}) \mid \partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1 \ (\alpha=0,1)\}}^{\|\cdot\|_{1,Z}}$$

Sei

$$(A.2.2) \quad U := \{u \in W_2^{(1)}(Z) \mid u_0 = t \cdot u_1\}$$

i) Es wird zunächst gezeigt: $H_t^{(1)}(Z) \subset U$

Sei also $u \in H_t^{(1)}(Z) \Rightarrow$ es gibt $\vec{v} \in L_2(Z)^3$ und eine Folge

$(u^{(j)})_{j \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{C}^2(\bar{Z})$ mit $\partial_n^\alpha u_0^{(j)} = t \cdot \partial_n^\alpha u_1^{(j)}$, $u^{(j)} \rightarrow u$ in $L_2(Z)$ und

$\vec{v} u^{(j)} \rightarrow \vec{v}$ in $L_2(Z)^3 \Rightarrow \vec{v} = \vec{v} u$ (also $u \in W_2^{(1)}(Z)$, siehe z.B.

/53, thm.2.3.1/) und $u_0 - t u_1 = \lim_{j \rightarrow \infty} (u_0^{(j)} - t u_1^{(j)}) = 0$ (wegen der

Stetigkeit der Spurabbildung).

ii) Es gilt: $H_t^{(1)}(Z) = U$

Angenommen, $H_t^{(1)}(Z) \subsetneq U$. Da $H_t^{(1)}(Z)$ in U abgeschlossen ist, gibt es dann ein $u \in U$, $u \neq 0$, sodaß gilt:

$$(A.2.3) \quad (v, u)_{1,Z} = 0 \text{ für alle } v \in H_t^{(1)}(Z)$$

Dies bedeutet für alle $v \in \mathcal{C}^2(\bar{Z})$ mit $\partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1$ ($\alpha = 0, 1$)

$$(A.2.4) \quad \int_Z (v^* - \bar{\Delta} v^*) u \, d^2 r_n = - \int_{\partial Z} v^* u \, ds = 0$$

Wählen wir speziell $v = w_{\vec{g}}$ nach Gl.(2.41), so folgt:

$$(A.2.5) \quad (1 + |\vec{K}_n + \vec{g}|^2) \langle w_{\vec{g}} | u \rangle_{L_2(Z)} = 0 \quad (\vec{g} \in G_2^*)$$

Da $\{w_{\vec{g}} \mid \vec{g} \in G_2^*\}$ eine Orthonormalbasis in $L_2(Z)$ ist, folgt $u = 0$ im Widerspruch zu $u \in U \setminus \{0\}$.

Anhang 3: Charakterisierung der Sobolevräume $H_t^{(s)}(Z)$

Vorbemerkung: Dem üblichen Vorgehen folgend, würde man die Sobolevräume $H_t^{(s)}(Z)$ als den Abschluß des Grundraumes $\mathcal{D}_t(Z)$ (Def. 2.51) unter der Graphennorm von $\hat{T}^{s/2}$ definieren. Dank der einfachen Gestalt der Elementarzelle Z und der Blochbedingung auf ∂Z ist es in der vorliegenden Situation möglich, sich der in diesem Fall äquivalenten Definition (2.47) zu bedienen, wobei der Schlüssel zur Charakterisierung der (u.U. verallgemeinerten) Funktionen $u \in H_t^{(s)}(Z)$ darin liegt, diese vermöge der Eigenfunktionen $w_{\vec{g}}$ von $\hat{T}$ (siehe Gl.(2.41)) auf die Folge ihrer Fourierkoeffizienten $(\langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z)_{\vec{g} \in G_2^*}$ isomorph abzubilden und letztere als Elemente eines Unterraumes des (mit dem gewöhnlichen Skalarprodukt versehenen) Hilbertraumes

$$(A.3.1) \quad l_2(G_2^*) := \left\{ \tilde{u}: G_2^* \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |\tilde{u}(\vec{g})|^2 < \infty \right\}$$

zu charakterisieren. Das Vorgehen lehnt sich eng an das von Stummel (/59, Kap.4, §2/) an (vgl. auch /60/):

1. Aus dem Hauptsatz der Theorie Fourierscher Reihen in $L_2(Z)$ folgt unmittelbar, daß die Fouriertransformation

$$(A.3.2) \quad \mathcal{F}: L_2(Z) \longrightarrow l_2(G_2^*), \quad \mathcal{F}u(\vec{g}) := \tilde{u}(\vec{g}) := \langle w_{\vec{g}} | u \rangle_{L_2(Z)}$$

eine isomorphe und isometrische Abbildung ist:

$$(A.3.3) \quad \langle u | v \rangle_{L_2(Z)} = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z \langle w_{\vec{g}} | v \rangle_Z = \langle \tilde{u} | \tilde{v} \rangle_{l_2(G_2^*)}$$

für $u, v \in L_2(Z)$

2. Mit Hilfe der Fouriertransformation $\mathcal{F}$ läßt sich für $u \in L_2(Z)$ eine einfache Bedingung dafür angeben, daß es in einem Raum $W_2^{(k)}(Z)$ liegt. Hierzu führen wir für $k \in \mathbb{N}$ die Folgenräume

$$(A.3.4) \quad l_2^{(k)}(G_2^*) := \left\{ \tilde{u} \in l_2(G_2^*) \mid \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^k |\tilde{u}(\vec{g})|^2 < \infty \right\}$$

ein (vgl. (2.40)) und zeigen:

Beh.3.1: a) Sei $u \in L_2(Z)$ und $\mathcal{F}u \in l_2^{(k)}(G_2^*)$; dann liegt u bereits in $W_2^{(k)}(Z)$.

b) Es gibt eine positive Konstante $C_k(\vec{k}_n, Z)$, sodaß für alle $u \in L_2(Z)$ mit $\tilde{u} = \mathcal{F}u \in l_2^{(k)}(G_2^*)$ gilt:

$$(A.3.5) \quad \|u\|_{k,Z}^2 \leq C_k(\vec{k}_n, Z) \cdot \sum_{\vec{g} \in G_2} \tau_{\vec{g}}^k |\tilde{u}(\vec{g})|^2$$

Beweis:

i) Wir setzen $u \in L_2(Z)$ mit $\mathcal{F}u \in l_2^{(k)}(G_2^*)$ bezüglich des Gitters $G_2 = \mathbb{Z} \vec{a}_1 \oplus \mathbb{Z} \vec{a}_2$ Bloch-periodisch fort in der Form

$$(A.3.6) \quad u(\vec{r}_n) = e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_n} \bar{u}(\vec{r}_n); \quad \bar{u} \in L_2(Z) \text{ gitterperiodisch bzgl. } G_2;$$

und reduzieren vermöge der affinen Koordinaten

$$(A.3.7) \quad \vec{r}_n = \xi^1 \vec{a}_1 + \xi^2 \vec{a}_2$$

die Situation auf die in /59/ vorausgesetzten Gegebenheiten:
Die Funktion

$$(A.3.8) \quad \hat{u}(\xi^1, \xi^2) := \bar{u}(\xi^1 \vec{a}_1 + \xi^2 \vec{a}_2) \quad \text{für } \xi \in \mathbb{R}^2$$

ist in jeder Variablen periodisch und ihre auf dem Gitter $2\pi\mathbb{Z}^2$ definierten Fourierkoeffizienten $\hat{\mathcal{F}}\hat{u}$ (bezüglich der Basisfunktionen $\exp(2\pi i(n_1 \xi^1 + n_2 \xi^2))$!) sind gegeben durch

$$(A.3.9) \quad \hat{\mathcal{F}}\hat{u}(n_1, n_2) = \frac{1}{\sqrt{A}} \mathcal{F}u(\vec{g}), \quad (\vec{g} = n_1 \vec{b}^1 + n_2 \vec{b}^2),$$

wobei $n_i \in \mathbb{Z}$ die Koordinaten von $\vec{g} \in G_2^*$ bzgl. der reziproken Basis $\vec{b}^i$ mit $\vec{b}^i \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ sind.

- ii) Da u und $\bar{u}$ nach (A.3.5) durch Multiplikation mit einer $\mathcal{C}^\infty$ -Funktion auseinander hervorgehen, lassen sich die verallgemeinerten Ableitungen $D^\alpha u$ nach der Leibnizregel durch die verallgemeinerten Ableitungen $D^\beta \bar{u}$ mit $|\beta| \leq |\alpha|$ darstellen (siehe (A.3.16)); es genügt daher zu zeigen: $\bar{u} \in W_2^{(k)}(Z)$.

- iii) Sei für $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ und $\bar{u}$ nach (A.3.5) definiert:

$$(A.3.10) \quad (\vec{a} \vec{\nabla})^\alpha \bar{u} := (\vec{a}_1 \vec{\nabla})^{\alpha_1} (\vec{a}_2 \vec{\nabla})^{\alpha_2} \bar{u}$$

Da nach der Kettenregel für verallgemeinerte Funktionen gilt:

$$(A.3.11) \quad D^\alpha \hat{u} = (\vec{a} \vec{\nabla})^\alpha \bar{u}$$

$$(A.3.12) \quad D^\alpha \bar{u} = \partial_1^{\alpha_1} \partial_2^{\alpha_2} \bar{u} \quad \text{mit} \quad \partial_k := \sum_{j=1}^2 \frac{1}{2\pi} (\vec{e}_k \vec{b}^j) (\vec{a}_j \vec{\nabla})$$

($\vec{e}_1, \vec{e}_2$ bezeichne die kartesische Basis der $\vec{r}_\Pi$ -Ebene),

ist $\bar{u} \in W_2^{(k)}(Z)$ genau dann, wenn $\hat{u} \in W_2^{(k)}([0,1]^2)$ gilt, sodaß wegen ii) letzteres zu zeigen bleibt.

- iv) Nach Stummel (/59, S.264, (13) und S.259, (9)/) ist eine hinreichende Bedingung für $\hat{u} \in W_2^{(k)}([0,1]^2)$, daß gilt:

$$(A.3.13) \quad \sum_{n \in \mathbb{Z}^2} (1 + (2\pi n_1)^2 + (2\pi n_2)^2)^k |\hat{\mathcal{F}}\hat{u}(n)|^2 < \infty$$

Wegen (A.3.9) ist dies äquivalent zu

$$(A.3.14) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2}^* (1 + (\vec{g}\vec{a}_1)^2 + (\vec{g}\vec{a}_2)^2)^k |\mathcal{F}u(\vec{g})|^2 < \infty.$$

Gemäß nachfolgend bewiesenem Lemma existiert ein $c(\vec{k}_\Pi, Z) > 0$ mit der Eigenschaft

$$(A.3.15) \quad 1 + (\vec{g}\vec{a}_1)^2 + (\vec{g}\vec{a}_2)^2 \leq c(\vec{k}_\Pi, Z) \cdot T_{\vec{g}} \quad (\vec{g} \in G_2^*),$$

sodaß aus der Voraussetzung $\mathcal{F}u \in l_2^{(k)}(G_2^*)$ eine konvergente Majorante für (A.3.14) $\equiv$ (A.3.13) gewonnen werden kann, womit a) gezeigt ist.

v) Um die Abschätzung b) zu erhalten, konkretisieren wir Punkt ii) für eine Funktion u gemäß a): Für $|\alpha| \leq k$ gilt:

$$(A.3.16) \quad D^\alpha u = D^\alpha (e^{i\vec{K}_n \vec{r}_n} \bar{u}) = \sum_{|\beta| \leq |\alpha|} A_{\alpha\beta}(\vec{K}_n) e^{i\vec{K}_n \vec{r}_n} D^\beta \bar{u}$$

mit dem Polynom

$$(A.3.17) \quad A_{\alpha\beta}(\vec{K}_n) := \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \cdot i^{|\alpha| - |\beta|} (\vec{K}_n)_1^{\alpha_1 - \beta_1} (\vec{K}_n)_2^{\alpha_2 - \beta_2},$$

sodaß man folgert:

$$(A.3.18) \quad \|D^\alpha u\|_{L_2(Z)}^2 = \sum_{|\beta|, |\gamma| \leq |\alpha|} A_{\alpha\gamma}(\vec{K}_n)^* A_{\alpha\beta}(\vec{K}_n) \langle D^\gamma \bar{u} | D^\beta \bar{u} \rangle_Z$$

Wegen $|\langle D^\gamma \bar{u} | D^\beta \bar{u} \rangle_Z| \leq \frac{1}{2} (\|D^\gamma \bar{u}\|_{L_2(Z)}^2 + \|D^\beta \bar{u}\|_{L_2(Z)}^2)$ erhalten wir daher die Abschätzung

$$(A.3.19) \quad \sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha u\|_{L_2(Z)}^2 \leq A_k(\vec{K}_n) \sum_{|\beta| \leq k} \|D^\beta \bar{u}\|_{L_2(Z)}^2,$$

wobei

$$(A.3.20) \quad A_k(\vec{K}_n) := \frac{(k+1)(k+2)}{2} \max_{|\beta|, |\gamma| \leq k} \left\{ \sum_{|\alpha| \leq k} |A_{\alpha\gamma}(\vec{K}_n)| |A_{\alpha\beta}(\vec{K}_n)| \right\}.$$

vi) Nach der Kettenregel ergibt sich mit (A.3.11)/(A.3.12) für ein u gemäß a) für $|\alpha| \leq k$:

$$(A.3.21) \quad D^\alpha \bar{u} = \sum_{j=0}^{|\alpha|} \sum_{|\beta|=j} B_{\alpha\beta}(Z) \left(\frac{\partial}{\partial \xi_1} \right)^{|\alpha|-j} \left(\frac{\partial}{\partial \xi_2} \right)^j \hat{u}$$

mit

$$(A.3.22) \quad B_{\alpha\beta}(Z) := \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{|\alpha|} \cdot \prod_{j=1}^2 \begin{pmatrix} \alpha_j \\ \beta_j \end{pmatrix} \cdot (\vec{b}^1)_j^{\alpha_j - \beta_j} (\vec{b}^2)_j^{\beta_j},$$

sodaß wir analog zu v) abschätzen können:

$$(A.3.23) \quad \sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha \bar{u}\|_{L_2(Z)}^2 \leq A \cdot B_k(Z) \sum_{|\beta| \leq k} \|D^\beta \hat{u}\|_{L_2([0,1]^2)}^2,$$

wobei

$$(A.3.24) \quad B_k(Z) := (k+1) \cdot \max_{0 \leq j, l \leq m \leq k} \left\{ \sum_{|\alpha|=m} \sum_{|\beta|=j} \sum_{|\gamma|=l} |B_{\alpha\beta}(Z)| |B_{\alpha\gamma}(Z)| \right\}$$

vii) Schließlich schließen wir mit Stummel (/59, S.264, (13); S.263, (5) und S.259, (11)/) auf die Ungleichung

$$(A.3.25) \quad \begin{aligned} \sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha \hat{u}\|_{L_2([0,1]^2)}^2 &\leq \sum_{|\alpha| \leq k} \binom{k}{|\alpha|} \|D^\alpha \hat{u}\|_{L_2([0,1]^2)}^2 = \\ &= \|\hat{\mathcal{F}}\hat{u}\|_{1^{k,2}(2\pi\mathbb{Z}^2)}^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}^2} (1 + (2\pi n_1)^2 + (2\pi n_2)^2)^k |\hat{\mathcal{F}}\hat{u}(n)|^2 \end{aligned}$$

Fassen wir (A.3.19), (A.3.23), (A.3.25) und (A.3.15) zusammen, folgt:

$$(A.3.26) \quad \|u\|_{k,Z}^2 \leq A_k(\vec{k}_n) \cdot B_k(Z) \cdot c(\vec{k}_n, Z)^k \sum_{\vec{g} \in G_2}^* T_{\vec{g}}^k |\mathcal{F}u(\vec{g})|^2 \quad \text{q.e.d.}$$

Es ist nun noch die folgende A-priori-Abschätzung für die "Gewichte" $T_{\vec{g}}$ in Def. (A.3.4) nachzutragen:

Lemma 3.1: Es gibt eine positive Konstante $c(\vec{k}_n, Z)$ mit

$$(A.3.27) \quad 1 + (\vec{g}\vec{a}_1)^2 + (\vec{g}\vec{a}_2)^2 \leq c(\vec{k}_n, Z) \cdot T_{\vec{g}}^* \quad (\vec{g} \in G_2^*)$$

Beweis:

i) Sei $0 < \varepsilon < 1$ und sei (mit $\text{diam}(\overline{BZ}_1) :=$ Durchmesser von $\overline{BZ}_1$),

$$(A.3.28) \quad \mathcal{G}(\varepsilon) := \left\{ \vec{g} \in G_2^* ; |\vec{g}| \leq \frac{\text{diam}(\overline{BZ}_1)}{1 - \varepsilon} \right\}$$

Wir definieren:

$$(A.3.29) \quad c(\vec{k}_n, Z) := \max \left\{ \frac{|\vec{a}_1|^2 + |\vec{a}_2|^2}{\varepsilon}, \frac{1 + (|\vec{a}_1|^2 + |\vec{a}_2|^2) |\vec{g}|^2}{|\vec{k}_n|^2 + E_0(\vec{k}_n)} \mid \vec{g} \in \mathcal{G}(\varepsilon) \right\}$$

ii) Dann gilt wegen $2|\vec{k}_n| \leq \text{diam}(\overline{BZ}_1)$:

$$(A.3.30) \quad (1 - \varepsilon) |\vec{g}| > 2|\vec{k}_n| \quad \text{für } \vec{g} \in G_2^* \setminus \mathcal{G}(\varepsilon)$$

woraus man schließt:

$$(A.3.31) \quad \varepsilon |\vec{g}|^2 < 2\vec{k}_n \vec{g} + |\vec{g}|^2 \quad \text{für } \vec{g} \in G_2^* \setminus \mathcal{O}(\varepsilon)$$

Somit ist für $\vec{g} \in G_2^* \setminus \mathcal{O}(\varepsilon)$

$$(A.3.32) \quad 1 + (\vec{g}\vec{a}_1)^2 + (\vec{g}\vec{a}_2)^2 \leq 1 + C(\vec{k}_n, Z)(2\vec{k}_n \vec{g} + |\vec{g}|^2)$$

und schließlich

$$(A.3.33) \quad 1 + (\vec{g}\vec{a}_1)^2 + (\vec{g}\vec{a}_2)^2 \leq C(\vec{k}_n, Z)(E_0(\vec{k}_n) + |\vec{k}_n|^2 + 2\vec{k}_n \vec{g} + |\vec{g}|^2) .$$

iii) Für $\vec{g} \in \mathcal{O}(\varepsilon)$ ist

$$(A.3.34) \quad 1 + (\vec{g}\vec{a}_1)^2 + (\vec{g}\vec{a}_2)^2 \leq C(\vec{k}_n, Z)(E_0(\vec{k}_n) + |\vec{k}_n|^2) .$$

Da $\vec{k}_n \in \overline{BZ}_1 = \{ \vec{k}_n \mid 2\vec{k}_n \vec{g} + |\vec{g}|^2 \geq 0 \text{ für alle } \vec{g} \in G_2^* \}$,

gilt (A.3.33) also auch für $\vec{g} \in \mathcal{O}(\varepsilon)$, womit (A.3.27) bewiesen ist.

q.e.d.

3. Wir detaillieren nun einige Aussagen zu den Räumen $H_t^{(s)}(Z)$ ($s \geq 0$):

Beh.3.2: Die Definitionen von $H_t^{(1)}(Z)$ als energetischer Raum zu T (Anhang 2) und als maximaler Definitionsbereich von $\mathcal{A}_1$ (Gl.(2.47)) stimmen überein.

Beweis:

Die Behauptung ist abstrakt bewiesen z.B. in /62,ch.VI,§2.6/; hier sei ein direkter Beweis (via Fouriertransformation) gegeben:

1.Inklusion: " $H_t^{(1)}(Z) \subset D(\mathcal{A}_1)$ "

Sei $u \in H_t^{(1)}(Z)$; da $\{T_{\vec{g}}^{-1/2} w_{\vec{g}} \mid \vec{g} \in G_2^*\}$ (Gl.2.40) eine ONB des energetischen Raumes $H_t^{(1)}(Z)$ ist (/53,ch.6,§6/), gilt:

$$(A.3.35) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^* |\langle u | w_{\vec{g}} \rangle_{L_2(Z)}|^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |(u | T_{\vec{g}}^{-1/2} w_{\vec{g}})_{H_t^{(1)}(Z)}|^2 = \\ = (u | u)_{H_t^{(1)}(Z)} < \infty,$$

also ist $u \in D(\mathcal{A}_1)$.

2.Inklusion: " $D(\mathcal{A}_1) \subset H_t^{(1)}(Z)$ "

Sei $u \in D(\mathcal{A}_1)$; dann ist für $v \in H_t^{(1)}(Z) \subset D(\mathcal{A}_1)$

$$(A.3.36) \quad v \mapsto |\langle \mathcal{A}_1 u | \mathcal{A}_1 v \rangle_{L_2(Z)}| \leq \|\mathcal{A}_1 u\|_{L_2(Z)} \|\mathcal{A}_1 v\|_{L_2(Z)} = \\ = \|\mathcal{A}_1 u\|_{L_2(Z)} \cdot \|v\|_{H_t^{(1)}(Z)}$$

ein stetiges Funktional auf $H_t^{(1)}(Z)$. Nach dem Rieszschen Darstellungssatz gibt es ein $w \in H_t^{(1)}(Z)$ mit

$$(A.3.37) \quad \langle \mathcal{A}_1 u | \mathcal{A}_1 v \rangle_{L_2(Z)} = (w | v)_{H_t^{(1)}(Z)} \quad \text{für } v \in H_t^{(1)}(Z).$$

Deshalb gilt für $v \in \mathcal{D}_t(Z) \subset H_t^{(1)}(Z) \subset D(\mathcal{A}_1)$:

$$(A.3.38) \quad \langle u | \hat{T} v \rangle_{L_2(Z)} = \langle \mathcal{A}_1 u | \mathcal{A}_1 v \rangle_{L_2(Z)} = (w | v)_{H_t^{(1)}(Z)} = \langle w | T v \rangle_{L_2(Z)}.$$

Da $w_{\tilde{g}} \in \mathcal{D}_t(Z)$, folgt:

$$(A.3.39) \quad T_{\tilde{g}} \langle u | w_{\tilde{g}} \rangle_{L_2(Z)} = \langle u | \hat{T} w_{\tilde{g}} \rangle_{L_2(Z)} = \langle w | T w_{\tilde{g}} \rangle_{L_2(Z)} = T_{\tilde{g}} \langle w | w_{\tilde{g}} \rangle_{L_2(Z)}$$

d.h. $\mathcal{F}u = \mathcal{F}w$ und somit $u = w \in H_t^{(1)}(Z)$

q.e.d.

Beh.3.3: $H_t^{(0)}(Z) = L_2(Z)$

Beweis:

Trivialerweise ist $D(\mathcal{A}_1^0) = D(\text{Id}) = L_2(Z)$.

Beh.3.4: $H_t^{(2)}(Z) = D(\hat{T}) = \{ u \in W_2^{(1)}(Z) \mid \text{die verallgemeinerte Ableitung } \bar{\Delta}u \text{ liegt in } L_2(Z); \partial_n u_j \text{ existiert und liegt in } L_2(\Gamma_1) \text{ und } \partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1 \ (\alpha=0,1) \}$ a1)

Beweis:

i) $H_t^{(2)}(Z) = D(\mathcal{A}_1^2) = \max.$ Definitionsbereich von $\mathcal{A}_1^2 = \hat{T}$ in $L_2(Z) =$ Definitionsbereich der Friedrichschen Fortsetzung (/53,ch.5,§7/ oder /62,VI,rem.2.24/).

ii) Sei $u \in W_2^{(1)}(Z)$ mit $\bar{\Delta}u \in L_2(Z)$ und $\partial_n^\alpha u_0 = t \cdot \partial_n^\alpha u_1 \ (\alpha=0,1)$. Dann ist nach (2.35) $u \in H_t^{(1)}(Z)$ und für $\varphi \in \mathcal{C}_0^\infty(Z)$ gilt:

$$(A.3.40) \quad (u | \varphi)_{H_t^{(1)}(Z)} = \langle u | -\bar{\Delta}\varphi + E_0\varphi \rangle_{L_2(Z)} = \langle u | -\bar{\Delta}\varphi + E_0\varphi \rangle_Z = \langle -\bar{\Delta}u + E_0u | \varphi \rangle_Z = \langle -\bar{\Delta}u + E_0u | \varphi \rangle_{L_2(Z)},$$

also ist wegen

$$(A.3.41) \quad |(u | \varphi)_{H_t^{(1)}(Z)}| \leq \| -\bar{\Delta}u + E_0u \|_{L_2(Z)} \| \varphi \|_{L_2(Z)}$$

und der Dichtheit von $\mathcal{C}_0^\infty(Z)$ in $H_t^{(1)}(Z)$ bzgl. der L_2 -Norm gezeigt:
 $u \in D(\hat{T})$.

a1) Dies ist als Präzisierung der bei Gl.(2.37) benutzten Schreibweise zu sehen.

iii) Sei umgekehrt $u \in D(\hat{T})$. Dann ist nach (2.35) $u \in W_2^{(1)}(Z)$ mit $u_0 = tu_1$ und die in $L_2(Z)$ dicht definierte Linearform

$$(A.3.42) \quad \mathcal{C}_0^\infty(Z) \ni \varphi \mapsto (u|\varphi)_{H_t^{(1)}(Z)} = \langle u | -\bar{\Delta}\varphi + E_0\varphi \rangle_{L_2(Z)} = \langle -\bar{\Delta}u + E_0u | \varphi \rangle_Z$$

ein in der L_2 -Norm stetiges Funktional. Nach dem Riesz'schen Darstellungssatz gibt es dann ein eindeutig bestimmtes $w \in L_2(Z)$ mit $-\bar{\Delta}u + E_0u = w$, also liegt $\bar{\Delta}u$ in $L_2(Z)$.

Es bleibt zu zeigen: $\partial_n u_0 = t \cdot \partial_n u_1$. Dazu vergewissern wir uns zunächst, daß die Spurabbildungen $\partial_n u_j$ als Elemente von $L_2(\Gamma_1)$ wohldefiniert sind, indem wir beachten, daß u sogar in $W_2^{(2)}(Z)$ liegt ^{a2)}: Nach i) gehört u zu $D(\mathcal{A}_1^2)$, sodaß $\tilde{u} = \mathcal{F}u$ in $L_2^{(2)}(G_2^*)$ liegt, und daher folgt $u \in W_2^{(2)}(Z)$ nach Beh.3.1.

Für das Funktional $(u| \cdot)_{H_t^{(1)}(Z)}$ hat man nun einerseits die Darstellung

$$(A.3.43) \quad H_t^{(1)}(Z) \ni v \mapsto (u|v)_{H_t^{(1)}(Z)} = \langle -\bar{\Delta}u + E_0u | v \rangle_{L_2(Z)} + \int_{\Gamma_1} (\partial_n u_1^* - t \partial_n u_0^*) v_1 ds,$$

andererseits wird es - wie oben gezeigt - als stetiges Funktional auf $L_2(Z)$ gerade von $w = -\bar{\Delta}u + E_0u$ erzeugt, sodaß man schließt:

$$(A.3.44) \quad \int_{\Gamma_1} (\partial_n u_1^* - t \partial_n u_0^*) v_1 ds = 0 \quad \text{für alle } v \in H_t^{(1)}(Z)$$

Durchläuft v den Raum $H_t^{(1)}(Z)$, so bildet seine Spur $v_1 = \text{tr}(v)|_{\Gamma_1}$ einen in $L_2(\Gamma_1)$ dichten Teilraum (siehe folgendes Lemma), sodaß aus (A.3.44) folgt:

$$(A.3.45) \quad \partial_n u_0 = t \cdot \partial_n u_1 \quad \text{in } L_2(\Gamma_1)$$

q.e.d.

a2) Im allgemeinen lassen sich aus " $\Delta u \in L_2$ " allein kaum Rückschlüsse auf die Regularitätseigenschaften der verallgemeinerten Ableitungen $D^\alpha u$ für $|\alpha| \leq 2$ ziehen (siehe z.B. /55, thm.11.10/ oder /59, S.310, nach(34)/). Dank der Charakterisierungsmöglichkeit via Fouriertransformation (siehe Beh.3.1) stellt sich das Problem im vorliegenden Fall einfacher dar.

Lemma 3.2: $\text{tr}|_{\Gamma_1}: H_t^{(1)}(Z) \rightarrow L_2(\Gamma_1)$, $v \mapsto v_1$ bildet $H_t^{(1)}(Z)$ auf einen in $L_2(\Gamma_1)$ dichten Teilraum ab.

Beweis:

Wir folgen der Argumentation von Nečas (/54, ch.6, §1.3/): Sei $h_1 \in L_2(\Gamma_1)$. Dann existiert eine Folge von Funktionen $(h_{n1})_{n \in \mathbb{N}} \subset W_2^{(1/2)}(\partial Z)$ ^{a3)} mit Träger im Inneren der Kanten $\Gamma_{k,1}$ (siehe Fig. 2.1.a) derart, daß $h_{n1} \rightarrow h_1$ in $L_2(\Gamma_1)$. Nun definieren wir - der Blochbedingung (2.18) entsprechend - durch

$$(A.3.46) \quad h_{n0}(\vec{r}_n + \vec{r}_k) := t(\vec{r}_n) \cdot h_{n1}(\vec{r}_k) \quad \text{und} \quad h_{n0}(\vec{r}_n) := 0 \\ \text{für } \vec{r}_n \in \Gamma_{k,1} \quad \text{und } n \in \mathbb{N}$$

eine Folge von Funktionen in $W_2^{(1/2)}(\partial Z)$ mit Träger im Inneren der Kanten $\Gamma_{k,0}$. Zu den Funktionen

$$(A.3.47) \quad h_n := h_{n0} + h_{n1} \in W_2^{(1/2)}(\partial Z)$$

gibt es Fortsetzungen $u_n \in W_2^{(1)}(Z)$ in dem Sinne, daß $\text{tr}(u_n) = h_n$ (siehe /54, ch.2, thm.5.7/). Wegen

$$(A.3.48) \quad \left. \begin{aligned} (u_n)_0(\vec{r}_n) &= \text{tr}(u_n)(\vec{r}_n + \vec{r}_k) = h_{n0}(\vec{r}_n + \vec{r}_k) \\ (u_n)_1(\vec{r}_n) &= \text{tr}(u_n)(\vec{r}_n) = h_{n1}(\vec{r}_n) \end{aligned} \right\} \quad \begin{aligned} &\text{für } \vec{r}_n \in \Gamma_{k,1} \\ &\text{und } n \in \mathbb{N} \end{aligned}$$

liegt die Folge $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$ in $H_t^{(1)}(Z)$ (siehe Def. (A.3.46) und Gl.(2.35)) und $\text{tr}(u_n)|_{\Gamma_1} = h_{n1}$ approximiert h_1 in $L_2(\Gamma_1)$. q.e.d.

Beh.3.5: Für $0 \leq r \leq s$ liegt $H_t^{(s)}(Z)$ dicht in $H_t^{(r)}(Z)$ und die Inklusion ist stetig. Die Graphennorm von $\bigwedge_1^s$ und die vom Skalarprodukt $(\cdot, \cdot)_{H_t^{(s)}(Z)}$ induzierte Norm sind äquivalente Normen auf $H_t^{(s)}(Z)$ (woraus sich die Vollständigkeit des Prähilbertraumes $H_t^{(s)}(Z)$ erklärt).

a3) Zur Definition der Sobolevräume $W_2^{(p/2)}(\partial Z)$ siehe /54, ch.2, §5.2/.

Beweis:

i) Sei $u \in H_t^{(s)}(Z) \Rightarrow u \in L_2(Z)$ und $\sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^s |\tilde{u}(\vec{g})|^2 < \infty$. Da nach

Gl.(2.40) für $\vec{g} \in G_2^*$ die Abschätzung $0 < T_{\vec{0}} \leq T_{\vec{g}}$ folgt, gilt:

$T_{\vec{g}}^r \leq T_{\vec{0}}^{r-s} \cdot T_{\vec{g}}^s$, sodaß $\sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^r |\tilde{u}(\vec{g})|^2 < \infty$ erfüllt ist.

Also ist $u \in H_t^{(r)}(Z)$ und

$$\begin{aligned} \|u\|_{H_t^{(r)}(Z)}^2 &= \|\mathcal{A}_1^r u\|_{L_2(Z)}^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |\langle w_{\vec{g}} | \mathcal{A}_1^r u \rangle_{L_2(Z)}|^2 = \\ &= \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |\langle \hat{r}^{r/2} w_{\vec{g}} | u \rangle_{L_2(Z)}|^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^r |\tilde{u}(\vec{g})|^2 \leq \\ &\leq T_{\vec{0}}^{r-s} \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^s |\tilde{u}(\vec{g})|^2 = T_{\vec{0}}^{r-s} \|u\|_{H_t^{(s)}(Z)}^2, \text{ d.h.} \end{aligned}$$

$$(A.3.49) \quad \|u\|_{H_t^{(r)}(Z)} \leq T_{\vec{0}}^{(r-s)/2} \|u\|_{H_t^{(s)}(Z)}$$

woraus " $H_t^{(s)}(Z) \hookrightarrow H_t^{(r)}(Z)$ stetig" folgt.

ii) Aus (A.3.49) schließt man unmittelbar für die Graphennorm von $\mathcal{A}_1^s$ (setze $r = 0$):

$$(A.3.50) \quad (\|u\|_{L_2(Z)}^2 + \|\mathcal{A}_1^s u\|_{L_2(Z)}^2)^{1/2} \leq (1 + T_{\vec{0}}^{-s})^{1/2} \|u\|_{H_t^{(s)}(Z)}$$

Da andererseits (trivialerweise) $\|u\|_{H_t^{(s)}(Z)} \leq (\|u\|_{L_2(Z)}^2 + \|\mathcal{A}_1^s u\|_{L_2(Z)}^2)^{1/2}$ gilt, ist die Äquivalenz beider Normen bewiesen.

iii) Als selbstadjungierter Operator ist $\mathcal{A}_1^s$ abgeschlossen (siehe z.B. /61, Vol.I, thm.VIII.3/, weshalb $H_t^{(s)}(Z)$ mit der Graphennorm vollständig normiert ist. Wegen ii) ist $(H_t^{(s)}(Z), (\cdot | \cdot)_{H_t^{(s)}(Z)})$ somit ein Hilbertraum.

- iv) Die lineare Hülle von $\{T_{\vec{g}}^{-r/2}w_{\vec{g}} \mid \vec{g} \in G_2^*\}$ liegt in $H_t^{(s)}(Z)$ und ist total in $H_t^{(r)}(Z)$ a4): Ist nämlich $u \in H_t^{(r)}(Z)$ und $(T_{\vec{g}}^{-r/2}w_{\vec{g}} \mid u)_{H_t^{(r)}(Z)} = 0$ für alle $\vec{g} \in G_2^*$, so ist $T_{\vec{g}}^{r/2} \langle w_{\vec{g}} \mid u \rangle_{L_2(Z)} = 0$ ($\vec{g} \in G_2^*$) und damit $u = \mathcal{F}^{-1}\tilde{u} = \mathcal{F}^{-1}(0) = 0$. Folglich ist $H_t^{(s)}(Z)$ dicht in $H_t^{(r)}(Z)$.
q.e.d.

Beh.3.6: $\mathcal{A}_1$ ist eine isometrische, isomorphe Abbildung von $H_t^{(s)}(Z)$ nach $H_t^{(s-1)}(Z)$ für $s \geq 1$.

Beweis:

- i) Sei $u \in H_t^{(s)}(Z) \subset H_t^{(1)}(Z) = D(\mathcal{A}_1)$. Dann ist $\mathcal{A}_1 u \in L_2(Z)$ und $\sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^{s-1} |\langle w_{\vec{g}} \mid \mathcal{A}_1 u \rangle_{L_2(Z)}|^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^s |\langle w_{\vec{g}} \mid u \rangle_{L_2(Z)}|^2 < \infty$, also $\mathcal{A}_1 u \in H_t^{(s-1)}(Z)$.

- ii) Für $u \in H_t^{(s)}(Z)$ ist

$$(A.3.51) \quad \|\mathcal{A}_1 u\|_{H_t^{(s-1)}(Z)} = \|\mathcal{A}_1^{s-1} \mathcal{A}_1 u\|_{L_2(Z)} = \|\mathcal{A}_1^s u\|_{L_2(Z)} = \|u\|_{H_t^{(s)}(Z)},$$

also ist $\mathcal{A}_1$ normtreu und damit injektiv.

- iii) Bleibt zu zeigen: $\mathcal{A}_1$ ist surjektiv.

Sei $v \in H_t^{(s-1)}(Z)$ und $\tilde{u}(\vec{g}) := T_{\vec{g}}^{-1/2} \langle w_{\vec{g}} \mid v \rangle_{L_2(Z)}$. Wegen

$$\sum_{\vec{g} \in G_2^*} |\tilde{u}(\vec{g})|^2 \leq T_0^{-1} \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |\langle w_{\vec{g}} \mid v \rangle_{L_2(Z)}|^2 < \infty \text{ ist } \tilde{u} \in l_2(G_2^*) \text{ und daher}$$

$$u := \mathcal{F}^{-1}\tilde{u} \in L_2(Z). \text{ Da } \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^s |\tilde{u}(\vec{g})|^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^{s-1} |\langle w_{\vec{g}} \mid v \rangle_{L_2(Z)}|^2 < \infty,$$

gilt sogar: $u \in H_t^{(s)}(Z)$. Schließlich ist $\mathcal{F}(\mathcal{A}_1 u - v)(\vec{g}) =$

$$= \langle \mathcal{A}_1 w_{\vec{g}} \mid u \rangle_{L_2(Z)} - \langle w_{\vec{g}} \mid v \rangle_{L_2(Z)} = T_{\vec{g}}^{1/2} \tilde{u}(\vec{g}) - \langle w_{\vec{g}} \mid v \rangle_{L_2(Z)} = 0,$$

also $\mathcal{A}_1 u = v$.

q.e.d.

a4) $\{T_{\vec{g}}^{-r/2}w_{\vec{g}} \mid \vec{g} \in G_2^*\}$ ist sogar eine Orthonormalbasis von $H_t^{(r)}(Z)$.

4. Bevor wir die Räume $H_t^{(-s)}(Z)$ ($s \geq 0$) charakterisieren, wollen wir die Fouriertransformation $\mathcal{F}$ auf Distributionen aus $\mathcal{D}_t(Z)'$ ausdehnen vermöge

$$(A.3.52) \quad \mathcal{F} : \mathcal{D}_t(Z)' \longrightarrow \mathcal{C}^{G_2^*}, \quad \mathcal{F}u(\vec{g}) := \tilde{u}(\vec{g}) := \langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z^*$$

Die Wirkung eines Funktionals $u \in H_t^{(-s)}(Z)$ auf eine Funktion $v \in H_t^{(s)}(Z)$ läßt sich dann vermöge der Fouriertransformation leicht beschreiben:

Beh.3.7: Sei $s \geq 0$, $u \in H_t^{(-s)}(Z)$ und $v \in H_t^{(s)}(Z)$. Dann gilt:

$$(A.3.53) \quad \langle u | v \rangle_Z = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \mathcal{F}u(\vec{g})^* \cdot \mathcal{F}v(\vec{g})$$

Korollar: $\mathcal{F} : H_t^{(-s)}(Z) \longrightarrow \mathcal{C}^{G_2^*}$ ist injektiv.

Beweis:

i) Die Fourierreihe $\sum_{\vec{g} \in G_2^*} \mathcal{F}v(\vec{g}) w_{\vec{g}}$ konvergiert gegen v in der Norm

$$\begin{aligned} \|\cdot\|_{H_t^{(s)}(Z)} \text{ und } u \text{ ist nach Def. (2.53) ein bzgl. dieser Norm stetiges} \\ \text{Funktional; also ist } \langle u | v \rangle_Z &= \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \mathcal{F}v(\vec{g}) \langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z = \\ &= \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \mathcal{F}u(\vec{g})^* \mathcal{F}v(\vec{g}) \end{aligned}$$

ii) Injektivität ist klar: $\mathcal{F}u(\vec{g}) = 0$ für alle $\vec{g} \in G_2^* \Rightarrow$

$$\Rightarrow \langle u | v \rangle_Z = 0 \text{ für alle } v \in H_t^{(s)}(Z).$$

q.e.d.

5. Hieraus gewinnt man eine Charakterisierung der Distributionsräume $H_t^{(-s)}(Z)$ via Fouriertransformation:

Beh.3.8: Sei $s \geq 0$. Dann gilt für $u \in \mathcal{D}_t(Z)'$:

i) u liegt in $H_t^{(-s)}(Z)$ genau dann, wenn

$$(A.3.54) \quad \|u\|_{H_t^{(-s)}(Z)}^2 := \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^{-s} |\mathcal{F}u(\vec{g})|^2 < \infty$$

ii) Für $u \in H_t^{(-s)}(Z)$ und $v \in H_t^{(s)}(Z)$ gilt:

$$(A.3.55) \quad |\langle u | v \rangle_Z| \leq \|u\|_{H_t^{(-s)}(Z)} \|v\|_{H_t^{(s)}(Z)}.$$

iii) $\|\cdot\|_{H_t^{(-s)}(Z)}$ ist die (üblicherweise verwendete) Supremumsnorm:

$$(A.3.56) \quad \|u\|_{H_t^{(-s)}(Z)} = \sup_{v \in H_t^{(s)}(Z)} \frac{|\langle u|v \rangle_Z|}{\|v\|_{H_t^{(s)}(Z)}} \quad \text{für } u \in H_t^{(-s)}(Z)$$

Beweis:

i) Nach (2.47) ist " $v \in H_t^{(s)}(Z)$ " äquivalent zu " $(T_{\vec{g}}^{s/2} \tilde{v}(\vec{g}))_{\vec{g} \in G_2^*} \in l_2(G_2^*)$ "; wegen (A.3.53) ist u also genau dann ein stetiges Funktional auf $H_t^{(s)}(Z)$, wenn $\sum_{\vec{g} \in G_2^*} (T_{\vec{g}}^{-s/2} \tilde{u}(\vec{g}))^* (T_{\vec{g}}^{s/2} \tilde{v}(\vec{g}))$ mit der Folge $(T_{\vec{g}}^{s/2} \tilde{v}(\vec{g}))_{\vec{g} \in G_2^*}$ als Argument ein stetiges Funktional auf $l_2(G_2^*)$ ist. Nach dem Rieszschen Darstellungssatz ist aber $l_2(G_2^*)' = l_2(G_2^*)$; daher konvergiert die Folge $(T_{\vec{g}}^{-s/2} \tilde{u}(\vec{g}))_{\vec{g} \in G_2^*}$ in $l_2(G_2^*)$ genau dann, wenn u in $H_t^{(-s)}(Z)$ liegt.

ii) Mit der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung erhält man:

$$\begin{aligned} |\langle u|v \rangle_Z| &= \left| \sum_{\vec{g} \in G_2^*} (T_{\vec{g}}^{-s/2} \tilde{u}(\vec{g}))^* (T_{\vec{g}}^{s/2} \tilde{v}(\vec{g})) \right| \leq \\ &\leq \left(\sum_{\vec{g} \in G_2^*} |T_{\vec{g}}^{-s/2} \tilde{u}(\vec{g})|^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{\vec{g} \in G_2^*} |T_{\vec{g}}^{s/2} \tilde{v}(\vec{g})|^2 \right)^{1/2} = \|u\|_{H_t^{(-s)}(Z)} \|v\|_{H_t^{(s)}(Z)} \end{aligned}$$

iii) Sei $u \in H_t^{(-s)}(Z)$ und

$$(A.3.57) \quad \|u\|_* := \sup_{v \in H_t^{(s)}(Z)} \frac{|\langle u|v \rangle_Z|}{\|v\|_{H_t^{(s)}(Z)}}$$

seine Supremumsnorm.

Die Folge $\tilde{v}_0(\vec{g}) := T_{\vec{g}}^{-s} \tilde{u}(\vec{g})$ für $\vec{g} \in G_2^*$ erfüllt

$$(A.3.58) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |T_{\vec{g}}^s \tilde{v}_0(\vec{g})|^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |T_{\vec{g}}^{-s} \tilde{u}(\vec{g})|^2 < \infty;$$

also ist $v_0 := \mathcal{F}^{-1} \tilde{v}_0 \in H_t^{(s)}(Z)$ und es gilt:

$$(A.3.59) \quad \langle u|v_0 \rangle_Z = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \tilde{u}(\vec{g})^* \tilde{v}_0(\vec{g}) = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} |T_{\vec{g}}^{-s} \tilde{u}(\vec{g})|^2 = \|u\|_{H_t^{(-s)}(Z)}^2$$

Da andererseits nach Gl.(A.3.58) $\|v_0\|_{H_t^{(s)}}(Z) = \|u\|_{H_t^{(-s)}}(Z)$ gilt, folgt mit Def. (A.3.57):

$$(A.3.60) \quad \|u\|_{H_t^{(-s)}}(Z) = \frac{|\langle u | v_0 \rangle_Z|}{\|v_0\|_{H_t^{(s)}}(Z)} \leq \|u\|_*$$

Wegen (A.3.55) gilt aber auch $\|u\|_* \leq \|u\|_{H_t^{(-s)}}(Z)$. q.e.d.

Auf $H_t^{(-s)}(Z)$ läßt sich nun in natürlicher Weise eine zu seiner Norm passende Hilbertraumstruktur erklären:

Beh.3.9: Mit Def. (2.55) wird auf $H_t^{(-s)}(Z)$ ein Skalarprodukt erklärt, welches die Norm $\|\cdot\|_{H_t^{(-s)}}(Z)$ induziert (und damit $H_t^{(-s)}(Z)$ zum Hilbertraum macht).

Beweis:

Wegen $|(u|v)_{H_t^{(-s)}}(Z)| = |\sum_{\vec{g} \in G_2} \tilde{u}(\vec{g})^* T_{\vec{g}}^{-s} \tilde{v}(\vec{g})| \leq \|u\|_{H_t^{(-s)}}(Z) \|v\|_{H_t^{(-s)}}(Z) < \infty$

ist mit (2.55) ein Skalarprodukt auf $H_t^{(-s)}(Z)$ wohldefiniert; nach Konstruktion ist $\|\cdot\|_{H_t^{(-s)}}(Z) = \sqrt{(\cdot|\cdot)_{H_t^{(-s)}}(Z)}$. Wegen Gl.(A.3.56) ist die hiervon induzierte Topologie gerade die Operatornorm-Topologie; folglich ist $H_t^{(-s)}(Z)$ vollständig (siehe z.B. /61, Vol.I, thm.III.2/). q.e.d.

Die Beziehung, in der die Räume $H_t^{(-r)}(Z)$ und $H_t^{(-s)}(Z)$ für $r, s \geq 0$ zueinander stehen, folgt unmittelbar durch Transposition der Beh.3.5:

Beh.3.10: Für $0 \leq r \leq s$ liegt $H_t^{(-r)}(Z)$ dicht in $H_t^{(-s)}(Z)$ und die Inklusion ist stetig.

Beweis:

Siehe /58, Vol.I, ch.1, §6.2/. Hier ein direkter Beweis:

i) Für $u \in H_t^{(-r)}(Z)$ ist wegen (A.3.56) und Beh.3.5

$$(A.3.61) \quad \|u\|_{H_t^{(-s)}}(Z) \leq T_0^{(r-s)/2} \|u\|_{H_t^{(-r)}}(Z) ,$$

also $H_t^{(-r)}(Z) \hookrightarrow H_t^{(-s)}(Z)$ stetig.

- ii) Die lineare Hülle von $\{ \langle T_{\vec{g}}^{s/2} w_{\vec{g}} | \cdot \rangle_{L_2(Z)} \mid \vec{g} \in G_2^* \}$ liegt in $H_t^{(-r)}(Z)$ und ist total in $H_t^{(-s)}(Z)$ a5): Ist nämlich $u \in H_t^{(-s)}(Z)$ und $(T_{\vec{g}}^{s/2} w_{\vec{g}} | u)_{H_t^{(-s)}(Z)} = 0$ für alle $\vec{g} \in G_2^*$, so ist $T_{\vec{g}}^{-s/2} \langle u | w_{\vec{g}} \rangle_Z^* = 0$ ($\vec{g} \in G_2^*$) und damit $\mathcal{F}u = 0$, mithin nach Beh.3.7 auch $u = 0$. Folglich ist $H_t^{(-r)}(Z)$ dicht in $H_t^{(-s)}(Z)$.

q.e.d.

Die Verallgemeinerung von Beh.3.6 auf den Fall $s < 1$ lautet nun:

Beh.3.11: $\mathcal{A}_1$ läßt sich für $s < 1$ zu einer isometrischen, isomorphen Abbildung von $H_t^{(s)}(Z)$ nach $H_t^{(s-1)}(Z)$ fortsetzen.

Beweis:

- i) Wir definieren für $u \in H_t^{(s)}(Z)$ ($s < 1$) durch Transposition

$$(A.3.62) \quad \mathcal{A}_1: H_t^{(s)}(Z) \rightarrow H_t^{(s-1)}(Z), \quad \langle \mathcal{A}_1 u | \varphi \rangle_Z := \langle u | \mathcal{A}_1 \varphi \rangle_Z \quad (\varphi \in \mathcal{D}_t(Z)).$$

Da $\mathcal{D}_t(Z) \subset H_t^{(r)}(Z)$ mit $r := 1 + \max \{-s, 0\}$, gilt (wegen Beh.3.5 und Beh.3.6) $\mathcal{A}_1 \mathcal{D}_t(Z) \subset H_t^{(r-1)}(Z) \subset H_t^{(-s)}(Z) \cap L_2(Z)$; also ist $\mathcal{A}_1 u$ als Linearform auf $\mathcal{D}_t(Z)$ wohldefiniert, mithin auf $H_t^{(1-s)}(Z)$ dicht definiert. Unter Verwendung von (A.3.53), der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung und (A.3.54) folgt

$$(A.3.63) \quad |\langle \mathcal{A}_1 u | \varphi \rangle_Z| \leq \|u\|_{H_t^{(s)}(Z)} \cdot \|\varphi\|_{H_t^{(1-s)}(Z)} \quad (\varphi \in \mathcal{D}_t(Z))$$

und damit $\mathcal{A}_1 u \in H_t^{(s-1)}(Z)$.

a5) $\{ \langle T_{\vec{g}}^{s/2} w_{\vec{g}} | \cdot \rangle_{L_2(Z)} \mid \vec{g} \in G_2^* \}$ ist sogar eine Orthonormalbasis von $H_t^{(-s)}(Z)$, die duale Basis zu $\{ T_{\vec{g}}^{-s/2} w_{\vec{g}} \mid \vec{g} \in G_2^* \} \subset H_t^{(s)}(Z)$.

ii) Für $u \in H_t^{(s)}(Z)$ ($s < 1$) gilt:

$$\begin{aligned} \| \mathcal{A}_1 u \|_{H_t^{(s-1)}(Z)}^2 &= \sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^{s-1} | \langle u | \mathcal{A}_1 w_{\vec{g}} \rangle_Z |^2 = \\ (A.3.64) \quad &= \sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^s | \tilde{u}(\vec{g}) |^2 = \| u \|_{H_t^{(s)}(Z)}^2. \end{aligned}$$

Also ist $\mathcal{A}_1$ normtreu und damit injektiv.

iii) Bleibt zu zeigen: $\mathcal{A}_1$ ist surjektiv.

Sei $v \in H_t^{(s-1)}(Z)$ ($s < 1$) und $\tilde{u}(\vec{g}) := T_{\vec{g}}^{-1/2} \tilde{v}(\vec{g})$.

Wegen $\sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^s | \tilde{u}(\vec{g}) |^2 = \sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^{s-1} | \tilde{v}(\vec{g}) |^2 < \infty$ definiert

$\langle u | \varphi \rangle_Z := \sum_{\vec{g} \in G_2} \tilde{u}(\vec{g})^* \tilde{\varphi}(\vec{g})$ eine in der $\| \cdot \|_{H_t^{(-s)}(Z)}$ -Norm

beschränkte Linearform auf $\mathcal{D}_t(Z)$, d.h. $u \in H_t^{(s)}(Z)$.

Wegen $\mathcal{F}(\mathcal{A}_1 u - v)(\vec{g}) = \langle \mathcal{A}_1 u | w_{\vec{g}} \rangle_Z^* - \langle v | w_{\vec{g}} \rangle_Z^* = T_{\vec{g}}^{1/2} \tilde{u}(\vec{g}) - \tilde{v}(\vec{g}) = 0$

und dem Korollar zu Beh.3.7 folgt: $\mathcal{A}_1 u = v$ q.e.d.

6. Schließlich wollen wir den folgenden, im Hinblick auf den die Lösungstheorie in Abschnitt 2.3 kommentierenden Anhang 4 wichtigen Sachverhalt festhalten:

Beh.3.12: Sei $k = 1$ oder $k = 2$. Dann sind auf dem Hilbertraum $H_t^{(k)}(Z)$ die

Normen $\| \cdot \|_{k,Z}$ (gemäß (2.20)) und $\| \cdot \|_{H_t^{(k)}(Z)} = \sqrt{(\cdot | \cdot)_{H_t^{(k)}(Z)}}$

(gemäß (2.48)) äquivalent.

Beweis:

- i) Für $k = 1$ folgt die Behauptung unmittelbar aus den Definitionen (2.20) und (2.34) (unter Beachtung der Friedrichschen Ungleichung (2.32) für den Fall $E_0(\vec{K}_n) = 0$, $\vec{K}_n \neq 0$!)

ii) Für $k = 2$ wissen wir wegen Beh.3.1 unter Beachtung von Def. (2.47) bereits:

$$(A.3.65) \quad \|u\|_{2,Z}^2 \leq c_2(\vec{k}_n, Z) \sum_{\vec{g} \in G_2} T_{\vec{g}}^2 |\mathcal{F}u(\vec{g})|^2 \quad (u \in H_t^{(2)}(Z))$$

Wegen (2.55) ist dies nur eine Umschreibung von

$$(A.3.66) \quad \|u\|_{2,Z}^2 \leq c_2(\vec{k}_n, Z) \|u\|_{H_t^{(2)}(Z)}^2 \quad (u \in H_t^{(2)}(Z))$$

iii) Andererseits erhalten wir mit Beh.3.4 (& Bew.) aus (2.48) für $u \in H_t^{(2)}(Z)$ die Abschätzung

$$(A.3.67) \quad \|u\|_{H_t^{(2)}(Z)}^2 = \|\bar{\Delta}u + E_0 u\|_{L_2(Z)}^2 \leq 2E_0^2 \|u\|_{L_2(Z)}^2 + 2\|\bar{\Delta}u\|_{L_2(Z)}^2$$

und wegen

$$(A.3.68) \quad \|\bar{\Delta}u\|_{L_2(Z)}^2 = \left\| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right\|_{L_2(Z)}^2 \leq 2 \left(\left\| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\|_{L_2(Z)}^2 + \left\| \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right\|_{L_2(Z)}^2 \right)$$

schließlich mit $\hat{c} := \max \{ 4, 2E_0(\vec{k}_n)^2 \}$

$$(A.3.69) \quad \|u\|_{H_t^{(2)}(Z)}^2 \leq \hat{c} \cdot \|u\|_{2,Z}^2 \quad (u \in H_t^{(2)}(Z))$$

q.e.d.

Anhang 4: Nachweis der Voraussetzungen für die schwache Lösbarkeit des Einzelschichtproblems und Charakterisierung der schwachen Lösungen.

1. Das Bild von $H_t^{(1)}(\Omega)$ und $H_t^{(2)}(\Omega)$ unter der Spurabbildung.

Beh.4.1: Die linearen Abbildungen

$$(A.4.1) \quad H_t^{(1)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto \varphi_X \in H_t^{(1/2)}(F_X) \quad (X = R, L)$$

$$(A.4.2) \quad H_t^{(2)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto (\varphi_X, \partial_n \varphi_X) \in H_t^{(3/2)}(F_X) \oplus H_t^{(1/2)}(F_X) \quad (X = R, L)$$

sind wohldefiniert, surjektiv und stetig.

Beweis:

Der Beweis lehnt sich eng an Lions & Magenes (/58, Vol.I, ch.1, thm.1.3/) an:

i) Für $k = 1, 2$ betrachten wir die Funktionenräume

$$(A.4.3) \quad W_t^{(k)}(z_L, z_R) := \left\{ u \mid \frac{d^j u}{dz^j} \in L_2(z_L, z_R; H_t^{(k-j)}(Z)) \text{ für } j = 0, \dots, k \right\}$$

(zur Def. siehe Fußnote 8; man beachte, daß für ein $u \in L_2(z_L, z_R; H_t^{(k)}(Z))$

die Ableitungen $\frac{d^j u}{dz^j}$ als $H_t^{(k)}(Z)$ -wertige Distributionen (/69/) wohldefiniert sind, sodaß " $\frac{d^j u}{dz^j} \in L_2(z_L, z_R; H_t^{(k-j)}(Z))$ " eine sinnvolle

Aussage ist !)

Es gilt das Lemma (beachte Def. (2.113) und Def. (2.137)):

$$\text{Lemma 4.1:} \quad H_t^{(k)}(\Omega) = W_t^{(k)}(z_L, z_R) \quad (k = 1, 2)$$

Beweis:

a) Sei $u \in L_2(z_L, z_R; H_t^{(k)}(Z))$. Für ein "festgehaltenes" $z \in [z_L, z_R]$ sind die partiellen Ableitungen

$$(A.4.4) \quad \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \right)^\alpha \Big|_z : H_t^{(k)}(Z \times \{z\}) \longrightarrow L_2(Z \times \{z\}) \quad (|\alpha| \leq k)$$

nach (2.47) und Beh.3.1 wohldefiniert und sogar stetige lineare Abbildungen, weil wegen Beh.3.12 (vgl. (A.3.5) bzw. (A.3.66)) gilt:

$$(A.4.5) \quad \left\| \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_n} \right)^\alpha u(z) \right\|_{L_2(Z)}^2 \leq C_k(\vec{k}_n, Z) \cdot \|u(z)\|_{H_t^{(k)}(Z)}^2 \quad (|\alpha| \leq k).$$

Daher können wir schließen:

$$(A.4.6) \quad \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_n} \right)^\alpha u \in L_2(z_L, z_R, L_2(Z)) \quad \text{für } |\alpha| \leq k$$

Nach dem Satz von Fubini (vgl. /61, Vol.I, thm.II.10 & problem II.12/) ist aber $L_2(z_L, z_R, L_2(Z))$ gerade mit $L_2(\Omega)$ zu identifizieren, also gilt:

$$(A.4.7) \quad \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_n} \right)^\alpha u \in L_2(\Omega) \quad (|\alpha| \leq k)$$

b) Ist überdies $\frac{d^j u}{dz^j} \in L_2(z_L, z_R, H_t^{(k-j)}(Z))$ für $j = 1, \dots, k$, so schließt man analog:

$$(A.4.8) \quad \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_n} \right)^\alpha \frac{d^j u}{dz^j} \in L_2(\Omega) \quad \text{für } |\alpha| \leq k-j$$

Dies ist aber nur eine andere Ausdrucksweise für

$$(A.4.9) \quad D^\alpha u \in L_2(\Omega) \quad \text{für } |\alpha| \leq k,$$

also $u \in W_2^{(k)}(\Omega)$.

c) Ein $u \in W_t^{(k)}(z_L, z_R)$ liegt also nach a) und b) in $W_2^{(k)}(\Omega)$ und erfüllt nach (2.35) bzw. (2.49)/(2.37)

$$(A.4.10) \quad \partial_n^\alpha u_0(z) = t \cdot \partial_n^\alpha u_1(z) \quad \text{in } L_2(\Gamma_1) \quad \text{für } \alpha \leq k-1$$

und fast alle $z \in [z_L, z_R]$;

d.h. aufgefaßt als Funktion $\Omega \rightarrow \mathbb{C}$ genügt u der Randbedingung

$$(A.4.11) \quad \partial_n^\alpha u_0(\vec{r}_n, z) = t \cdot \partial_n^\alpha u_1(\vec{r}_n, z) \quad \text{in } L_2(S_t) \quad (\alpha \leq k-1),$$

da ja $S_t = \Gamma_1 \times [z_L, z_R]$ (siehe Def. (2.10) ff.).

Daher gehört u zu $H_t^{(k)}(\Omega)$ (Def. (2.113) bzw. (2.137)).

d) Sei umgekehrt nun für $k = 1$ oder $k = 2$ $\varphi \in H_t^{(k)}(\Omega)$. Dann gilt:

$$(A.4.12) \quad \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_t} \right)^\alpha \varphi \in L_2(\Omega) = L_2(z_L, z_R, L_2(Z)) \quad (|\alpha| \leq k),$$

also gehört $u(z) := \varphi(., z)$ für fast alle $z \in [z_L, z_R]$ zu $W_2^{(k)}(Z)$,
und weil φ die Blochbedingung (A.4.11) erfüllt, genügt u der Randbe-
dingung (A.4.10), sodaß somit gilt:

$$(A.4.13) \quad u(z) \in H_t^{(k)}(Z) \quad \text{für fast alle } z \in [z_L, z_R].$$

Wegen der Äquivalenz der Normen $\|.\|_{k,Z}$ und $\|.\|_{H_t^{(k)}(Z)}$ (siehe
Beh.3.12) folgt:

$$(A.4.14) \quad \int_{z_L}^{z_R} \|u(z)\|_{H_t^{(k)}(Z)}^2 dz \leq \hat{C} \cdot \int_{z_L}^{z_R} \|u(z)\|_{k,Z}^2 dz = \hat{C} \cdot \sum_{|\alpha| \leq k} \int_{\Omega} \left| \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_t} \right)^\alpha \varphi \right|^2 d^3 r < \infty,$$

womit gezeigt ist:

$$(A.4.15) \quad u \in L_2(z_L, z_R; H_t^{(k)}(Z))$$

e) Da für $\varphi \in H_t^{(k)}(\Omega)$ die verallgemeinerte Ableitung $\frac{\partial^k \varphi}{\partial z^k} \in L_2(\Omega)$ ist
und - aufgefaßt als Element von $L_2(z_L, z_R, L_2(Z))$ - gerade die Distribu-
tionsableitung $\frac{d^k u}{dz^k}$ erzeugt, gilt:

$$(A.4.16) \quad \frac{d^k u}{dz^k} \in L_2(z_L, z_R, L_2(Z))$$

Im Falle $k = 1$ ist das Lemma damit bewiesen; im Falle $k = 2$ folgt mit
dem Theorem über die Ableitungsinterpolation (/58, Vol.1, ch.1, thm.2.3/)
die Aussage

$$(A.4.17) \quad \frac{du}{dz} \in L_2(z_L, z_R, [H_t^{(2)}(Z), L_2(Z)]_{1/2})$$

Hierbei ist der "interpolierende" Raum $[H_t^{(2)}(Z), L_2(Z)]_{1/2}$ gemäß Lions & Magenes (/58, Vol.1, ch.1, Def.2.1/) wegen Beh.3.2 ($H_t^{(1)}(Z) = D(\Lambda_1)$), Beh.3.4 ($H_t^{(2)}(Z) = D(\Lambda_1^2) = D(\hat{T})$) und der Äquivalenz der Graphennorm von Λ_1^S mit der $\|\cdot\|_{H_t(s)}(Z)$ -Norm (Beh.3.5) gegeben durch

$$(A.4.18) \quad [H_t^{(2)}(Z), L_2(Z)]_{1/2} = D(\hat{T}^{1/2}) = D(\Lambda_1) = H_t^{(1)}(Z)$$

(siehe auch direkt /58, Vol.1, ch.1, §2.4/): $H_t^{(1)}(Z) = [D(\hat{T}), L_2(Z)]_{1/2}$.

Somit ist auch für $k = 2$ gezeigt: $\varphi \equiv u \in W_t^{(k)}(z_L, z_R)$.

q.e.d.

ii) Unter Beachtung von Lemma 4.1. folgt mit dem Theorem über die Spurabbildung (/58, Vol.1, ch.1, thm.3.1/), daß die Funktionen $z \mapsto \frac{\partial^j \varphi}{\partial z^j}(\cdot, z)$ ($j = 0, \dots, k-1$) identifiziert werden können mit stetigen (!) Abbildungen

$$(A.4.19) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto \frac{\partial^j \varphi}{\partial z^j}(\cdot, z) \in [H_t^{(k)}(Z), L_2(Z)]_{\frac{j}{k} + \frac{1}{2k}} \quad (j=0, \dots, k-1).$$

Für die interpolierenden Räume gemäß Lions & Magenes (/58, Vol.1, ch.1, Def. 2.1/) erhalten wir - wiederum unter Beachtung von Beh.3.2, Beh.3.4, Beh.3.5 und Def. (2.47) - folgende Resultate:

$$(A.4.20) \quad [H_t^{(1)}(Z), L_2(Z)]_{1/2} = [D(\Lambda_1), L_2(Z)]_{1/2} = D(\Lambda_1^{1/2}) = H_t^{(1/2)}(Z)$$

$$(A.4.21) \quad [H_t^{(2)}(Z), L_2(Z)]_{1/4} = [D(\hat{T}), L_2(Z)]_{1/4} = D(\hat{T}^{3/4}) = H_t^{(3/2)}(Z)$$

$$(A.4.22) \quad [H_t^{(2)}(Z), L_2(Z)]_{3/4} = [D(\hat{T}), L_2(Z)]_{3/4} = D(\hat{T}^{1/4}) = H_t^{(1/2)}(Z)$$

Somit garantiert das Theorem über die Spurabbildung insbesondere, daß für $k = 1$ $\varphi_X = \varphi(\cdot, z_X)$ als Element von $H_t^{(1/2)}(F_X)$ ($X = R, L$) und

für $k = 2$ $\partial_n^\alpha \varphi_X = (\tilde{n}\tilde{e}_Z)^\alpha \frac{\partial^\alpha \varphi}{\partial z^\alpha}(\cdot, z_X)$ als Element von $H_t^{(3/2-\alpha)}(F_X)$ ($X = R, L$; $\alpha = 0, 1$) wohldefiniert sind; weiterhin besagen dieses Theorem und dessen Ergänzung (/58, Vol.1, ch.1, thm.3.2/), daß die Spurabbildungen

$$(A.4.23) \quad \begin{aligned} H_t^{(1)}(\Omega) &= W_t^{(1)}(z_L, z_R) \longrightarrow H_t^{(1/2)}(F_X) \\ \varphi &\longmapsto \varphi_X \quad (X = R, L) \end{aligned}$$

$$(A.4.24) \quad \begin{aligned} H_t^{(2)}(\Omega) &= W_t^{(2)}(z_L, z_R) \longrightarrow H_t^{(3/2)}(F_X) \oplus H_t^{(1/2)}(F_X) \\ \varphi &\longmapsto (\varphi_X, \partial_n \varphi_X) \quad (X = R, L) \end{aligned}$$

stetig und surjektiv sind.

q.e.d.

2. Zwei A-priori-Abschätzungen

Beh.4.2: Es gibt eine Konstante $C(\Omega) > 0$, sodaß für alle $\varphi, \chi \in W_2^{(1)}(\Omega)$ gilt:

$$(A.4.25) \quad \left| \int_{\Omega} w \chi^* \varphi \, d^3r \right| \leq C(\Omega) \|w\|_{L_2(\Omega)} \|\chi\|_{1,\Omega} \|\varphi\|_{1,\Omega}$$

Beweis:

i) Nach den Sobolev'schen Einbettungssätzen (/54, ch.2, thm.3.4/) folgt $W_2^{(1)}(\Omega) \subset L_4(\Omega)$ mit stetiger Inklusion:

$$(A.4.26) \quad \|\varphi\|_{L_4(\Omega)} \leq c(\Omega) \cdot \|\varphi\|_{1,\Omega} \quad \text{für } \varphi \in W_2^{(1)}(\Omega)$$

ii) Für $\chi, \varphi \in L_4(\Omega)$ ist $\chi^* \varphi \in L_2(\Omega)$; da nach (2.24) $w \in L_2(\Omega)$ vorausgesetzt ist, liefert die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung:

$$(A.4.27) \quad \left| \int_{\Omega} w \chi^* \varphi \, d^3r \right| \leq \|w\|_2 \|\chi^* \varphi\|_2 \leq \|w\|_2 \|\chi\|_4 \|\varphi\|_4$$

iii) Wegen i) und ii) erhält man (A.4.25) mit $C(\Omega) := c(\Omega)^2$.

Beh.4.3: Zu $\varepsilon > 0$ gibt es eine Konstante $\kappa(\varepsilon, \Omega) > 0$, sodaß für $1 \leq q < 6$ gilt:

$$(A.4.28) \quad \|\varphi\|_{L_q(\Omega)}^2 \leq \varepsilon \int_{\Omega} |\vec{\nabla} \varphi|^2 \, d^3r + \kappa(\varepsilon, \Omega) \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2 \quad \text{für } \varphi \in W_2^{(1)}(\Omega)$$

Beweis:

Diese Ungleichung ist eine spezielle Form des Ehrling-Nirenbergschen Theorems, siehe z.B. /66/.

3. Nachweis der für schwache Lösungen des Einzelschichtproblems erforderlichen Regularitätsvoraussetzungen

Es ist zu zeigen, daß die in Abschnitt 2.3.1 genannten Bedingungen (B1)-(B5) erfüllt sind.

Zu (B1): Die Beschränktheit von $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Omega}$ auf $H_t^{(1)}(\Omega) \times H_t^{(1)}(\Omega)$ ist eine triviale Aussage und wird im übrigen von Bedingung (B4) impliziert. Für B gilt die

Beh.4.4: B ist eine beschränkte Sesquilinearform $H_t^{(1)}(\Omega) \times H_t^{(1)}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$

Beweis:

Für $\varphi, \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ ergibt die Anwendung der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung

$$(A.4.29) \quad |B(\varphi, \chi)| \leq \left(\int_{\Omega} |\vec{\nabla} \varphi|^2 d^3 r \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega} |\vec{\nabla} \chi|^2 d^3 r \right)^{1/2} + \left| \int_{\Omega} w \chi^* \varphi d^3 r \right| + \\ + \alpha \|\varphi\|_{1/2, F} \|\chi\|_{1/2, F} .$$

Wegen der Stetigkeit der Spurabbildung (2.117) existiert ein $k = k(\Omega, \vec{k}_s) > 0$ mit

$$(A.4.30) \quad \|\varphi\|_{1/2, F} \leq k \cdot \|\varphi\|_{1, \Omega} \quad \text{für alle } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) ,$$

sodaß man zusammen mit (A.4.25) abschätzen kann:

$$(A.4.31) \quad |B(\varphi, \chi)| \leq (1 + C(\Omega) \|w\|_2 + \alpha k(\Omega, \vec{k}_s)^2) \cdot \|\varphi\|_{1, \Omega} \|\chi\|_{1, \Omega} \\ \text{q.e.d.}$$

Zu (B2): Die Bedingung ist wegen Beh.4.1 (A.4.1) erfüllt.

Zu (B3): Die Hermitezität von B und $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\Omega}$ ist per constructionem (Def. (2.119) und (2.120)) gegeben.

Zu (B4): Die Vollstetigkeit von $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ auf $H_t^{(1)}(\Omega) \times H_t^{(1)}(\Omega)$ folgt aus der Vollstetigkeit auf $W_2^{(1)}(\Omega) \times W_2^{(1)}(\Omega)$; letzteres ist eine Folge der Poincaréschen Ungleichung (siehe z.B. /54, ch.1, thm.1.5/) und der Friedrichschen Ungleichung. Der Beweis ist explizite bei Stummel (/59, Kap.4, §3.2, (16)-(19)/) geführt.

Zu (B5): Die starke Koerzitivität der Randwertaufgabe (2.118) ist die Aussage der

Beh.4.5: Es gibt ein $\beta = \beta(\Omega, w) > 0$ und ein $\hat{E} = \hat{E}(\Omega, w) \in \mathbb{R}$, sodaß

$$(A.4.32) \quad \beta \|\varphi\|_{1,\Omega}^2 + \hat{E} \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2 \leq B(\varphi, \varphi) \quad \text{für alle } \varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) .$$

Beweis:

Wir setzen

$$(A.4.33) \quad \varepsilon_0(w) := \begin{cases} \|w\|_2^{-1} , & \text{falls } \|w\|_2 \neq 0 \\ 1 & , \text{falls } \|w\|_2 = 0 \end{cases}$$

und wählen ein ε mit

$$(A.4.34) \quad 0 < \varepsilon < \varepsilon_0(w) .$$

Sei nun

$$(A.4.35) \quad \beta := 1 - \varepsilon \|w\|_2 > 0$$

$$(A.4.36) \quad \hat{E} := - \|w\|_2 \kappa(\varepsilon, \Omega) - \beta$$

($\kappa(\varepsilon, \Omega)$ gemäß (A.4.28)!))

Wegen (A.4.27) und (A.4.28) gilt für $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$

$$(A.4.37) \quad - \int_\Omega w |\varphi|^2 d^3r \leq \|w\|_2 \left(\varepsilon \int_\Omega |\vec{\nabla} \varphi|^2 d^3r + \kappa(\varepsilon, \Omega) \|\varphi\|_2^2 \right) ,$$

woraus folgt:

$$(A.4.38) \quad \begin{aligned} B(\varphi, \varphi) &\geq (1 - \varepsilon \|w\|_2) \cdot \int_\Omega |\vec{\nabla} \varphi|^2 d^3r - \|w\|_2 \kappa(\varepsilon, \Omega) \|\varphi\|_2^2 = \\ &= \beta \|\varphi\|_{1,\Omega}^2 + \hat{E} \|\varphi\|_2^2 \end{aligned}$$

q.e.d.

4. Ergänzende Betrachtungen zum Greenschen Operator und der Regularität schwacher Lösungen

Die Lösungstheorie von Stummel (/59,Kap.1,§3.3/) liefert zunächst einen Greenschen Operator als stetige lineare Abbildung

$$(A.4.39) \quad \tilde{G}_E : H_t^{(1/2)}(F) \longrightarrow H_t^{(1)}(\Omega) \quad ,$$

wobei die schwache Lösung ψ_b zu $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ vermöge

$$(A.4.40) \quad \psi_b = \tilde{G}_E a_b \quad ; \quad a_b \in H_t^{(1/2)}(F)$$

mit

$$(A.4.41) \quad \langle b|u \rangle_F = (a_b|u)_{1/2,F} \quad \text{für alle } u \in H_t^{(1/2)}(F)$$

gegeben ist. Die letzte, a_b definierende Beziehung ist aber wegen (2.56) äquivalent zu

$$(A.4.42) \quad b = (\mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_1) a_b \quad ,$$

wobei

$$(A.4.43) \quad \mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_1 : H_t^{(1/2)}(F) \longrightarrow H_t^{(-1/2)}(F)$$

ein isometrischer Isomorphismus ist. Der Greensche Operator G_E nach (2.125) ist dann die Komposition

$$(A.4.44) \quad G_E : H_t^{(-1/2)}(F) \longrightarrow H_t^{(1)}(\Omega) \quad , \quad G_E = \tilde{G}_E \circ (\mathcal{L}_1 \oplus \mathcal{L}_1)^{-1}.$$

Die Lösungsmenge $\{\psi_b \mid b \in H_t^{(-1/2)}(F)\}$ ist dann für $E \notin \sigma$ sowohl das Bild $R(\tilde{G}_E)$ von $H_t^{(1/2)}(F)$ unter der Abbildung $\tilde{G}_E$ als auch das Bild $R(G_E)$ von $H_t^{(-1/2)}(F)$ unter der Abbildung G_E und nach Stummel (/59,Kap.1, §3.1,(20)/) gemäß Gl.(2.118) gegeben. Wir wollen hier zwei Eigenschaften der Elemente von $R(G_E)$ herausstellen:

a) Sei $\varphi \in R(G_E)$; dann ist also $J_E(\varphi, \cdot)$ eine Linearform auf $H_t^{(1)}(\Omega)$ mit

$$(A.4.45) \quad |J_E(\varphi, \chi)| \leq C \|\chi\|_{H_t^{(1/2)}(F)} \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$$

Speziell für $\chi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ ist $\text{tr } \chi = 0$, also ist

$$(A.4.46) \quad 0 = J_E(\varphi, \chi) = \int_{\Omega} \varphi^* (-\Delta \chi + (w-E)\chi) d^3r \quad ;$$

dies bedeutet aber, daß

$$(A.4.47) \quad -\Delta \varphi + (w-E)\varphi = 0 \quad \text{in } \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)' \quad ,$$

also im Distributionssinn, gilt.

b) Angenommen, $\varphi \in R(G_E)$ liegt sogar in $W_2^{(2)}(\Omega)$ und $w\varphi$ in $L_2(\Omega)$; dann ist (A.4.47) in $L_2(\Omega)$ erfüllt. Da nunmehr bei der partiellen Integration auch nach φ zweimal differenziert werden darf, bekommt man aus (2.118) die Aussage:

$$(A.4.48) \quad \begin{aligned} &\text{Für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega) \text{ gilt: } 0 = \int_{\Omega} [-\Delta \varphi + (w-E)\varphi]^* \chi d^3r = \\ &= \int_{S_t} (t^* \partial_n \varphi_0 - \partial_n \varphi_1)^* \chi_1 d\sigma + \langle b - \mathcal{A} \varphi - \partial_n \varphi | \chi \rangle_F \end{aligned}$$

Analog zu Lemma 3.2 (siehe auch /51, Lemma in App.1/) und unter Beachtung von Beh.4.1 zeigt man, daß $(\text{tr } \chi|_{S_t}, \text{tr } \chi|_F)$ eine in $L_2(S_t) \oplus H_t^{(1/2)}(F)$ dichte Menge aufspannen, wenn χ den Raum $H_t^{(1)}(\Omega)$ durchläuft, sodaß aus (A.4.48) folgt, daß φ neben der wesentlichen Randbedingung in Def. (2.113) nun auch als natürliche Randbedingungen die in Gl.(2.130) angegebenen Beziehungen erfüllt.

Anhang 5: Die Realisierung des Einzelschichtproblems im Hilbertraum
 $L_2(\Omega)$ (starke Lösungen)

1. Konstruktion des Hamiltonoperators H aus der Randwertaufgabe (2.143) a6)

Wir wollen zunächst die Gültigkeit der Aussagen (L6)-(L8) nachweisen.

Zu (L6):

Für das Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega$ auf $L_2(\Omega)$ gilt aufgrund der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung die Abschätzung

$$(A.5.1) \quad |\langle \varphi | \chi \rangle_\Omega| \leq \|\varphi\|_{L_2(\Omega)} \|\chi\|_{1,\Omega} \quad \text{für } \varphi, \chi \in H_t^{(1)}(\Omega).$$

Nach Stummel (/59, S.59, (26)-(28)/) folgt dann (L6).

Zu (L7):

- i) Die Bedingung (B6) ist gerade die Bedingung (K) von Stummel (/59, S.68/) und garantiert nach /59, S.69, (27)-(28)/ die Existenz eines auf $L_2(\Omega)$ dicht definierten abgeschlossenen Operators H mit dem in $L_2(\Omega)$ eingebetteten Raum $R(\hat{G}_0)$ als Definitionsbereich, welcher die Eigenschaft besitzt, daß seine Adjungierte $H^\dagger$ gleich dem formal-adjungierten (d.h. komplex-konjugierten) Operator H^* ist. Für ein reelles Potential w gilt aber $H^* = H$, weshalb H selbstadjungiert ist.
- ii) Für $E \in \mathbb{C}$ hat $H - E$ bis auf die Selbstadjungiertheit dieselben Eigenschaften wie H ; wegen (L6) gilt für die Definitionsbereiche

$$(A.5.2) \quad D(H - E) = D(H) \quad .$$

Nach /59, S.71, (35)-(37)/ löst ein $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ die Randwertaufgabe (2.143) genau dann, wenn gilt:

$$(A.5.3) \quad \varphi \in D(H - E) = D(H) \quad \text{und} \quad (H - E)\varphi = f.$$

a6) Der so konstruierte Hamiltonoperator stimmt mit dem von Lions & Magenes (/58, Vol.I, ch.2, §8.4/) betrachteten überein.

Zu (L8):

Da (B6) erfüllt ist, schließt man mit Stummel (/59,S.76,(15) und S.78,(22)/), daß die Resolventenmenge gerade das Komplement der Folge der Eigenwerte σ nach (L1) ist und die Resolvente die Darstellung (2.154) besitzt. Wegen (B2') und (B6) folgt nach /59,S.79,(24)/ die Vollstetigkeit der Resolvente.

2. Konstruktion des Hamiltonoperators H als Friedrichsche Fortsetzung des Differentialoperators $-\Delta + w$

Nach oben angegebener abstrakter Konstruktion des Hamiltonoperators H wollen wir uns vergewissern, daß wir mit H eine selbstadjungierte Fortsetzung des uns vertrauten Differentialoperators $-\Delta + w$ gewonnen haben.

Zu (L9):

Wegen $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega) \subset D(-\Delta + w) \subset L_2(\Omega)$ ist $-\Delta + w$ in $L_2(\Omega)$ dicht definiert. Mit dem Gaußschen Integralsatz erhält man für $\varphi, \chi \in D(-\Delta + w)$ gemäß (2.115) die Beziehung

$$(A.5.4) \quad \int_{\Omega} \varphi^* (-\Delta + w) \chi \, d^3r = \int_{\Omega} (\vec{\nabla} \varphi^* \vec{\nabla} \chi + \varphi^* w \chi) \, d^3r + \alpha \int_F \varphi^* \Lambda_1 \chi \, d^2r_{||} ;$$

d.h.

$$(A.5.5) \quad \int_{\Omega} \varphi^* (-\Delta + w) \chi \, d^3r = B(\varphi, \chi) \quad \text{für } \varphi, \chi \in D(-\Delta + w) .$$

Daher ist $-\Delta + w$ wegen (B3) symmetrisch und wegen (A.4.38) halbbeschränkt mit unterer Schranke $\hat{E}$ gemäß (A.4.36).

Bei der Konstruktion der Friedrichschen Fortsetzung von $-\Delta + w$ lehnen wir uns an die Darstellung von Weidmann (/67,§5.5/) an:

Der energetische Raum H_B ist als Abschluß von $D(-\Delta + w)$ unter der vom energetischen Skalarprodukt

$$(A.5.6) \quad (\varphi | \chi)_B := B(\varphi, \chi) + (1 - \hat{E}) \langle \varphi | \chi \rangle_{\Omega} \quad (\varphi, \chi \in D(-\Delta + w))$$

induzierten Norm definiert. Nun gilt offensichtlich

$$(A.5.7) \quad [\varphi, \varphi] \leq (\varphi | \varphi)_B \leq (1 - 1/\hat{E})[\varphi, \varphi] \quad \text{für } \varphi \in D(-\Delta + w),$$

wobei das Skalarprodukt $[\cdot, \cdot]$ in Def. (2.131) erklärt ist. Damit ist die Norm $\sqrt{(\cdot | \cdot)_B}$ äquivalent zur Norm $\sqrt{[\cdot, \cdot]}$, welche ihrerseits nach (L5) zur $\|\cdot\|_{1, \Omega}$ -Norm äquivalent ist, und wir erhalten so H_B als Abschluß von $D(-\Delta + w)$ unter der $\|\cdot\|_{1, \Omega}$ -Norm als Teilraum von $H_t^{(1)}(\Omega)$:

$$(A.5.8) \quad H_B = \overline{D(-\Delta + w)}^{\|\cdot\|_B} = \overline{D(-\Delta + w)}^{\|\cdot\|_{1, \Omega}} \subset H_t^{(1)}(\Omega)$$

Es gilt sogar die

Beh.5.1:

$$(A.5.9) \quad H_B = H_t^{(1)}(\Omega)$$

Beweis:

Angenommen, $H_B \subsetneq H_t^{(1)}(\Omega)$. Da H_B in $H_t^{(1)}(\Omega)$ abgeschlossen ist, gibt es dann ein $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$, $\varphi \neq 0$, sodaß gilt:

$$(A.5.10) \quad [\chi, \varphi] = 0 \quad \text{für alle } \chi \in H_B.$$

Die Eigenvektoren φ_j des Einzelschichtproblems, aufgefaßt als schwache Lösungen des Randwertproblems (2.118) zu $b = 0$, sind gerade die Eigenvektoren der Friedrichschen Fortsetzung (siehe z.B. /53, ch.6, §3/) und liegen damit insbesondere alle im energetischen Raum H_B ; also gilt:

$$(A.5.11) \quad [\varphi_j, \varphi] = 0 \quad \text{für } j \in \mathbb{N}$$

und somit nach (L5) $\varphi = 0$ im Widerspruch zu $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega) \setminus \{0\}$.

q.e.d.

Der Definitionsbereich der Friedrichschen Fortsetzung von $-\Delta + w$ ist gegeben durch (siehe /67, Satz 5.38/)

$$(A.5.12) \quad D(\widetilde{-\Delta + w}) := \{ \varphi \in H_B \mid B(\varphi, \cdot) \text{ ist in der } L_2(\Omega)\text{-Norm beschränkt} \}.$$

Wegen (A.5.9) folgt durch Vergleich mit (2.148) und (2.152)

$$(A.5.13) \quad D(\widetilde{-\Delta + w}) = R(\hat{G}_0) = D(H).$$

Die Wirkung der Friedrichschen Fortsetzung auf ein $\varphi \in D(H)$ ist erklärt durch (siehe /67, Satz 5.38/)

$$(A.5.14) \quad \langle (\widetilde{-\Delta + w})\varphi \mid \chi \rangle_\Omega = B(\varphi, \chi) \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega).$$

Nach (L7) schließt man dann:

$$(A.5.15) \quad H\varphi = (\widetilde{-\Delta + w})\varphi \quad \text{für } \varphi \in D(H).$$

3. Direkte Charakterisierung des Definitionsbereiches von $D(H)$

Zu (L10):

Wir wollen uns zunächst vergewissern, daß $D(H)$ im Spezialfall $w = 0$ durch (2.156) charakterisiert wird; dann überzeugen wir uns, daß die "Störung" w hieran nichts ändert. Wir definieren dementsprechend

$$(A.5.16) \quad H_0 := H \text{ gemäß (L7) mit } w := 0.$$

Beh.5.2: Für $\varphi \in D(H_0)$ liegt die Distributionsableitung $\Delta\varphi$ in $L_2(\Omega)$ und es gilt:

$$(A.5.17) \quad H_0\varphi = -\Delta\varphi.$$

Beweis:

Sei $\varphi \in D(H_0)$; nach (2.152) und (2.148) existiert dann $H_0\varphi \in L_2(\Omega)$ mit

$$(A.5.18) \quad B(\varphi, \chi) = \langle H_0\varphi \mid \chi \rangle_\Omega \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega).$$

Für $\chi \in \mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ erhält man durch partielle Integration und nach Definition der verallgemeinerten Ableitung

$$(A.5.19) \quad \langle H_0 \varphi | \chi \rangle_\Omega = \langle \varphi | -\Delta \chi \rangle_\Omega = \langle -\Delta \varphi | \chi \rangle .$$

Da $\mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ in $L_2(\Omega)$ dicht liegt, folgt $-\Delta \varphi = H_0 \varphi \in L_2(\Omega)$.
q.e.d.

Im Spezialfall des freien Elektrons lassen sich das Spektrum und die Eigenlösungen des Einzelschichtproblems analytisch angeben:

Beh.5.3: Die Eigenfunktionen und das Spektrum von H_0 sind gegeben durch

$$(A.5.20) \quad \varphi_{\vec{g},n}(\vec{r}) = w_{\vec{g}}(\vec{r}_\parallel) u_{\vec{g},n}(z) \quad (\vec{g} \in G_2^*, n \in \mathbb{N}) ,$$

$$(A.5.21) \quad E_{\vec{g},n} = |\vec{k}_\parallel + \vec{g}|^2 + \varepsilon_{\vec{g},n}$$

wobei $\{w_{\vec{g}} | \vec{g} \in G_2^*\}$ die Orthonormalbasis von $L_2(Z)$ gemäß (2.41) ist und die Funktionen $\{u_{\vec{g},n} | n \in \mathbb{N}\}$ die Eigenlösungen des folgenden Sturm-Liouville-Problems zum Eigenwert $\varepsilon_{\vec{g},n}$ bezeichnen:

$$(A.5.22) \quad -\frac{d^2 u}{dz^2} = \varepsilon u \quad (z_L < z < z_R)$$

$$(A.5.23) \quad \mathcal{A}_{\vec{g}} u(z_L) - \frac{du}{dz}(z_L) = 0 \quad \text{und} \quad \mathcal{A}_{\vec{g}} u(z_R) + \frac{du}{dz}(z_R) = 0$$

($\mathcal{A}_{\vec{g}} := \alpha(|\vec{k}_\parallel + \vec{g}|^2 + E_0(\vec{k}_\parallel))^{1/2}$ für $\vec{g} \in G_2^*$ sind die Eigenwerte des Operators $\mathcal{A}$ nach (2.112)).

Für jedes $\vec{g} \in G_2^*$ ist $\{u_{\vec{g},n} | n \in \mathbb{N}\}$ nach geeigneter Normierung eine Orthonormalbasis von $L_2(z_L, z_R)$. Die Eigenwerte $\varepsilon_{\vec{g},n}$ sind im Falle $\alpha > 0$ bestimmt durch die transzendente Gleichung (siehe Fig. A.5.1)

$$(A.5.24) \quad \sqrt{\varepsilon_{\vec{g},n}} \cdot \frac{d}{2} = \operatorname{arccot} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{\vec{g},n}}}{\mathcal{A}_{\vec{g}}} \right) + (n-1) \frac{\pi}{2} \quad (n=1,2,\dots; d:=z_R-z_L) ,$$

im Falle $\alpha = 0$ gilt

$$(A.5.25) \quad \varepsilon_{\vec{g},n} = \left[\frac{(n-1)\pi}{d} \right]^2 \quad (n = 1,2,\dots) ,$$

und sie genügen der Ungleichung

$$(A.5.26) \quad \left(\frac{(n-1)\pi}{d} \right)^2 \leq \epsilon_{\vec{g},n} < \left(\frac{n\pi}{d} \right)^2 \quad (n = 1, 2, \dots)$$

Die Eigenfunktionen $u_{\vec{g},n}$ haben (mit einer Normierung $N_{\vec{g},n}$) die Form

$$(A.5.27) \quad u_{\vec{g},n}(z) = N_{\vec{g},n} \cdot \sin(\sqrt{\epsilon_{\vec{g},n}} \cdot (z - \frac{z_R + z_L}{2}) - n \cdot \frac{\pi}{2}) \quad \text{für } n=1, 2, \dots$$

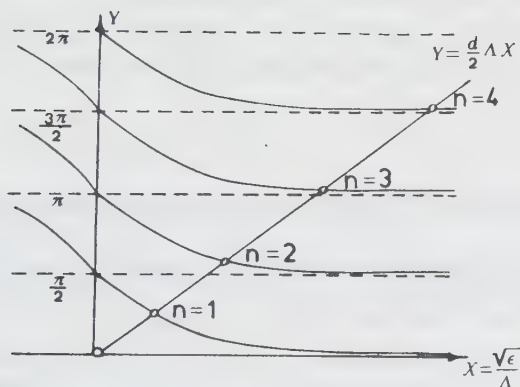


Fig. A.5.1:

Graphische Bestimmung der Eigenwerte $\epsilon_{\vec{g},n}$

Beweis:

i) Das Sturm-Liouville-Problem (A.5.22) und (A.5.23) ist wegen $\Lambda_{\vec{g}} > 0$ korrekt gestellt und hat eine abzählbare, gegen Unendlich strebende Folge einfacher reeller positiver Eigenwerte $\{\epsilon_{\vec{g},n} | n \in \mathbb{N}\}$. Das zugehörige Eigenfunktionensystem $\{u_{\vec{g},n} | n \in \mathbb{N}\}$ ist vollständig und orthogonal in $L_2(z_L, z_R)$ (siehe z.B. /52, Vol.I, Kap.V, §3/); wir setzen es als orthonormiert voraus.

ii) Man rechnet sofort nach, daß der Separationsansatz (A.5.20) Eigenfunktionen zum Randwertproblem (2.143) und damit wegen (L7) auch von H_0 nach (A.5.16) mit Eigenwerten gemäß (A.5.21) liefert. Wegen der Vollständigkeit von $\{w_{\vec{g}} | \vec{g} \in G_2^*\}$ in $L_2(Z)$ und von $\{u_{\vec{g},n} | n \in \mathbb{N}\}$ in $L_2(z_L, z_R)$ hat man für $\varphi \in L_2(\Omega) = L_2(Z) \otimes L_2(z_L, z_R) = L_2(z_L, z_R; L_2(Z))$

die Darstellung (/61, Vol. I, thm. II.10 & Problem II.12/)

$$(A.5.28) \quad \varphi(., z) = \sum_{\vec{g} \in G_2}^* \left(\sum_{n \in \mathbb{N}} \langle u_{\vec{g}, n}(\hat{z}) | \langle w_{\vec{g}} | \varphi(., \hat{z}) \rangle_{L_2(Z)} \rangle_{L_2(z_L, z_R)} u_{\vec{g}, n}(z) w_{\vec{g}} \right),$$

sodaß $\{ \varphi_{\vec{g}, n} \mid (\vec{g}, n) \in G_2^* \times \mathbb{N} \}$ eine Orthonormalbasis von $L_2(\Omega)$ ist, woraus wegen (2.123) folgt, daß es keine weiteren Eigenlösungen gibt.

iii) Die allgemeine Lösung von (A.5.22) hat die Form

$u(z) = N \cdot \sin(\sqrt{\epsilon} z + \delta)$ mit $N, \delta \in \mathbb{R}$; eingesetzt in die Randbedingungen ergibt sich nach einigen Zwischenrechnungen (A.5.24)-(A.5.27).

q.e.d.

Mit Hilfe der Eigenfunktionen des freien Elektrons läßt sich nun zeigen:

Beh.5.4: Für $\varphi \in D(H_0)$ liegen für $|\alpha| \leq 2$ alle verallgemeinerten Ableitungen "parallel zu Z" der Form $\left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}\right)^\alpha \varphi$ in $L_2(\Omega)$.

Beweis:

i) Sei $\varphi \in D(H_0)$; nach Beh.5.2 ist dann $\Delta \varphi \in L_2(\Omega)$. Für die Eigenfunktionen $\varphi_{\vec{g}, n}$ nach (A.5.20) gilt

$$(A.5.29) \quad B(\varphi_{\vec{g}, n}, \varphi) = E_{\vec{g}, n} \langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_\Omega$$

sowie wegen (A.5.18) und (A.5.17)

$$(A.5.30) \quad B(\varphi_{\vec{g}, n}, \varphi) = \langle \varphi_{\vec{g}, n} | -\Delta \varphi \rangle_\Omega ;$$

also folgt wegen $\Delta \varphi \in L_2(\Omega)$:

$$(A.5.31) \quad \sum_{\vec{g} \in G_2}^* \sum_{n \in \mathbb{N}} E_{\vec{g}, n}^2 |\langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_\Omega|^2 < \infty$$

ii) Da $\varphi \in D(H_0) \subset H_t^{(1)}(\Omega)$, ist nach Anhang 4 ((A.4.19) und (A.4.20)) die Spurabbildung $[z_L, z_R] \ni z \mapsto \varphi(., z)$ eine stetige Abbildung nach $H_t^{(1/2)}(Z)$; daher ist für jedes $\vec{g} \in G_2^*$

$$(A.5.32) \quad [z_L, z_R] \ni z \mapsto \langle w_{\vec{g}} | \varphi(., z) \rangle_Z \in \mathbb{C}$$

eine stetige Funktion. Insbesondere gilt (siehe (A.5.28)):

$$(A.5.33) \quad \begin{aligned} & \int_{z_L}^{z_R} |\langle w_{\vec{g}} | \varphi(., z) \rangle_Z|^2 dz = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{N}} |\langle u_{\vec{g}, n}(z) | \langle w_{\vec{g}} | \varphi(., z) \rangle_{L_2(Z)} \rangle_{L_2(z_L, z_R)}|^2 = \\ & = \sum_{n \in \mathbb{N}} |\langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_{\Omega}|^2 \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Ungleichung (siehe (A.5.21) und (2.40))

$$(A.5.34) \quad T_{\vec{g}}^2 \leq 2(E_{\vec{g}, n}^2 + E_0(K_s)^2) \quad (\vec{g} \in G_2^*),$$

kann nun aus (A.5.31) geschlossen werden:

$$(A.5.35) \quad \int_{z_L}^{z_R} \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^2 |\langle w_{\vec{g}} | \varphi(., z) \rangle_Z|^2 dz = \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \sum_{n \in \mathbb{N}} T_{\vec{g}}^2 |\langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_{\Omega}|^2 < \infty$$

Dies bedeutet wegen (2.47), daß $\varphi(., z)$ für fast alle $z \in [z_L, z_R]$ in $H_t^{(2)}(Z)$ liegt und φ sich (unter Beachtung von (2.55)) als Element von $L_2(z_L, z_R, H_t^{(2)}(Z))$ ⁸⁾ auffassen läßt. Die restlichen Beweisschritte sind nun identisch mit denen im Beweis zur Beh.4.1 ((A.4.4)-(A.4.7)).
q.e.d.

Nun sind wir in der Lage, die Charakterisierung von $D(H_0)$ gemäß (2.156) zu beweisen:

Beh.5.5: $D(H_0) = \{ \varphi \in W_2^{(2)}(\Omega) \mid \partial_n^\alpha \varphi_0 = t \cdot \partial_n^\alpha \varphi_1 \text{ in } L_2(S_t) \ (\alpha = 0, 1) \\ \text{und } \mathcal{A}\varphi + \partial_n \varphi = 0 \text{ in } L_2(F) \}$

Beweis:

- i) Hat ein $\varphi \in W_2^{(2)}(\Omega)$ die Eigenschaften auf der rechten Seite, so folgt für $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ durch partielle Integration

$$(A.5.36) \quad |B(\varphi, \chi)| = |\langle -\Delta\varphi | \chi \rangle_\Omega| \leq \|\Delta\varphi\|_{L_2(\Omega)} \cdot \|\chi\|_{L_2(\Omega)},$$

also gilt nach (2.152) $\varphi \in D(H_0)$.

- ii) Sei umgekehrt $\varphi \in D(H_0)$. Dann liegen nach Beh.5.2 und Beh.5.4 die verallgemeinerten Ableitungen $\Delta\varphi$, $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$ und $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}$ (mit $\vec{r}_i = (x, y)$) in $L_2(\Omega)$. Die diesen Differentialoperatoren zugeordneten charakteristischen Polynome

$$(A.5.37) \quad P_1(\vec{r}) = x^2 + y^2 + z^2; \quad P_2(\vec{r}) = x^2; \quad P_3(\vec{r}) = y^2$$

sind homogen vom Grad 2 und besitzen keine von Null verschiedene gemeinsame komplexe Nullstelle. Nach einem auf Aronszajn und Smith (/68/) zurückgehenden Satz (siehe z.B. /55, thm.11.10/) gehört dann φ zu $W_2^{(2)}(\Omega)$.

- iii) Für $\varphi \in D(H_0) \cap W_2^{(2)}(\Omega)$ gilt nach (A.5.18) und (A.5.17) einerseits

$$(A.5.38) \quad B(\varphi, \chi) = \langle -\Delta\varphi | \chi \rangle_\Omega \quad \text{für } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega),$$

andererseits darf man nun nach φ zweimal differenzieren und erhält nach partieller Integration für alle $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$

$$(A.5.39) \quad B(\varphi, \chi) = \langle -\Delta\varphi | \chi \rangle_\Omega + \int_{\partial\Omega} \partial_n \varphi^* \chi \, d\sigma + \alpha(\varphi, \chi)_{1/2, F}.$$

Durch Vergleich beider Beziehungen erhalten wir

$$(A.5.40) \quad \int_{S_t} (\partial_n \varphi_1^* - t \cdot \partial_n \varphi_0^*) \chi_1 \, d\sigma + \int_F (\partial_n \varphi + \lambda \varphi)^* \chi \, d^2 r_\parallel = 0$$

für $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$.

Mit der bereits in Anhang 4 (Abschnitt 4b) dargestellten Argumentation folgt, daß die natürlichen Randbedingungen (2.130) von φ in $L_2(S_t)$ bzw. $L_2(F)$ erfüllt werden; die wesentliche Randbedingung " $\varphi_0 = t\varphi_1$ " wird wegen $D(H_0) \subset H_t^{(1)}(\Omega)$ ohnehin befriedigt.

Es bleibt nun noch zu zeigen, daß die "Störung" w den Definitionsbereich von H_0 nicht verkleinert; hierzu benötigen wir folgende A-priori-Abschätzung:

Beh.5.6: a) $D(H_0) \subset \mathcal{C}^0(\overline{\Omega})$

b) Zu $\varepsilon > 0$ gibt es eine Konstante $K = K(\varepsilon, \Omega, \vec{k}_n) > 0$, sodaß für alle $\varphi \in D(H_0)$ gilt:

$$(A.5.41) \quad \|\varphi\|_{\infty, \Omega} := \sup_{\vec{r} \in \overline{\Omega}} |\varphi(\vec{r})| \leq \varepsilon \|\Delta \varphi\|_{L_2(\Omega)} + K \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}$$

Beweis:

Zu a) $D(H_0) \subset W_2^{(2)}(\Omega) \subset \mathcal{C}^0(\overline{\Omega})$, wobei die erste Inklusion aus Beh.5.5 folgt und die zweite Inklusion eine Konsequenz der Sobolevschen bzw. Kondrašovschen Einbettungssätze ist (/54, ch.2, thm.3.8 bzw. cons.6.3/).

Zu b)

i) Nach der Sobolevschen Ungleichung (siehe z.B. /55, thm.3.9/) gibt es zu $\eta > 0$ ein $c(\eta, \Omega) > 0$ mit

$$(A.5.42) \quad \|\varphi\|_{\infty, \Omega} \leq \eta \left(\sum_{|\alpha|=2} \int_{\Omega} |D^\alpha \varphi|^2 d^3r \right)^{1/2} + c(\eta, \Omega) \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}$$

für alle $\varphi \in W_2^{(2)}(\Omega)$.

ii) Nach dem oben erwähnten Satz von Aronszajn und Smith (/68/) in der speziellen Fassung von Agmon (/55, thm.11.10/) existiert eine positive Konstante $C(\Omega)$ mit

$$(A.5.43) \quad \left(\sum_{|\alpha|=2} \int_{\Omega} |D^\alpha \varphi|^2 d^3r \right)^{1/2} \leq C(\Omega) (\|\Delta \varphi\|_{L_2(\Omega)} + \left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right\|_{L_2(\Omega)} + \left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right\|_{L_2(\Omega)} + \|\varphi\|_{L_2(\Omega)})$$

für alle $\varphi \in W_2^{(2)}(\Omega)$

((x,y) = kartesische Koordinaten von $\vec{r}_n$)

- iii) Ein $\varphi \in D(H_0)$ liegt in $L_2(Z_L, Z_R, H_t^{(2)}(Z))$ (vgl. Bew. zu Beh.5.4);
mit Ungleichung (A.4.5) folgt die Abschätzung

$$(A.5.44) \quad \left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right\|_{L_2(\Omega)}^2 = \int_{Z_L}^{Z_R} \left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(\cdot, z) \right\|_{L_2(Z)}^2 dz \leq c_2(\vec{k}_n, Z) \int_{Z_L}^{Z_R} \|\varphi(\cdot, z)\|_{H_t^{(2)}(Z)}^2 dz,$$

woraus wir durch "Einschieben" der Orthonormalbasis $\{\varphi_{\vec{g}, n}\}$
gemäß (A.5.20) mit den Beziehungen (2.55) und (A.5.34) die
folgende Abschätzung erhalten:

$$\begin{aligned} (A.5.45) \quad & \left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right\|_{L_2(\Omega)}^2 \leq \\ & \leq c_2(\vec{k}_n, Z) \sum_{\vec{g} \in G_2^*} T_{\vec{g}}^2 \int_{Z_L}^{Z_R} |\langle w_{\vec{g}} | \varphi(\cdot, z) \rangle_Z|^2 dz = \\ & = c_2(\vec{k}_n, Z) \sum_{\vec{g} \in G_2^*} \sum_{n \in \mathbb{N}} T_{\vec{g}}^2 |\langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_{\Omega}|^2 \leq \\ & \leq 2c_2(\vec{k}_n, Z) \sum_{(\vec{g}, n) \in G_2^* \times \mathbb{N}} (E_{\vec{g}, n}^2 + E_0(\vec{k}_n)^2) |\langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_{\Omega}|^2 = \\ & = 2c_2(\vec{k}_n, Z) \sum_{(\vec{g}, n) \in G_2^* \times \mathbb{N}} (|\langle \varphi_{\vec{g}, n} | H_0 \varphi \rangle_{\Omega}|^2 + E_0(\vec{k}_n)^2 |\langle \varphi_{\vec{g}, n} | \varphi \rangle_{\Omega}|^2) = \\ & = 2c_2(\vec{k}_n, Z) (\|H_0 \varphi\|_{L_2(\Omega)}^2 + E_0(\vec{k}_n)^2 \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2) \leq \\ & \leq 2c_2(\vec{k}_n, Z) (\|H_0 \varphi\|_{L_2(\Omega)} + E_0(\vec{k}_n) \|\varphi\|_{L_2(\Omega)})^2 \end{aligned}$$

(und die entsprechende Ungleichung für $\left\| \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right\|_{L_2(\Omega)}$)

- iv) Zu $\varepsilon > 0$ wählen wir

$$(A.5.46) \quad \eta := \varepsilon \cdot [C(\Omega)(1 + 2\sqrt{2c_2(\vec{k}_n, Z)})]^{-1}$$

$$(A.5.47) \quad K := \eta \cdot C(\Omega)(1 + 2E_0(\vec{k}_n)\sqrt{2c_2(\vec{k}_n, Z)}) + c(\eta, \Omega)$$

Durch Einsetzen von (A.5.45) und (A.5.43) in (A.5.42) folgt dann
die behauptete Abschätzung (A.5.41)

q.e.d.

Damit erhalten wir nun das gewünschte Resultat:

Beh.5.7: a) Der Multiplikationsoperator w in $L_2(\Omega)$

$$(A.5.48) \quad D(w) := W_2^{(2)}(\Omega) \ni \varphi \mapsto w\varphi \in L_2(\Omega)$$

ist wohldefiniert, symmetrisch und H_0 -beschränkt mit H_0 -Schranke kleiner als 1.

b) Für den Schrödingeroperator H gemäß (L7) gilt:

$$(A.5.49) \quad H = H_0 + w \quad \text{mit } D(H) = D(H_0)$$

Beweis:

Zu a)

i) Für $\varphi \in W_2^{(2)}(\Omega) \subset \mathcal{C}^0(\overline{\Omega})$ gilt

$$(A.5.50) \quad \int_{\Omega} |w\varphi|^2 d^3r \leq \sup_{\vec{r} \in \overline{\Omega}} |\varphi(\vec{r})|^2 \cdot \|w\|_{L_2(\Omega)}^2 < \infty,$$

also ist w auf $W_2^{(2)}(\Omega)$ wohldefiniert, damit auf $L_2(\Omega)$ dicht definiert und wegen $w(\vec{r}) \in \mathbb{R}$ symmetrisch.

ii) Nach Beh.5.5 ist $D(H_0) \subset D(w)$ und w genügt wegen Beh.5.6 und (A.5.50) der Abschätzung

$$(A.5.51) \quad \begin{aligned} \|w\varphi\|_{L_2(\Omega)} &\leq \|w\|_{L_2(\Omega)} \|\varphi\|_{\infty, \Omega} \leq \\ &\leq \varepsilon \|w\|_{L_2(\Omega)} \|H_0\varphi\|_{L_2(\Omega)} + K \|w\|_{L_2(\Omega)} \|\varphi\|_{L_2(\Omega)} \end{aligned}$$

für alle $\varphi \in D(H_0)$.

Daraus folgt die H_0 -Beschränktheit von w ; die H_0 -Schranke ist offenkundig 0.

Zu b) Nach dem Satz von Rellich-Kato (siehe /62, ch.V, thm.4.3/ oder /67, Satz 5.28/) ist unter der Voraussetzung a) der Operator $H_0 + w$ selbstadjungiert und $D(H_0 + w) = D(H_0)$. Wegen Beh.5.2 und Beh.5.5 ist $H_0 + w$ damit eine selbstadjungierte Fortsetzung des Differentialoperators $-\Delta + w$ (mit Definitionsbereich nach (2.155)); andererseits ist nach (L9) der Schrödingeroperator H gemäß (L7) ebenfalls eine selbstadjungierte Fortsetzung von $-\Delta + w$, und da sowohl $D(H_0 + w) = D(H_0)$ als auch $D(H)$ im energetischen Raum $H_B = H_t^{(1)}(\Omega)$ (vgl. Beh.5.1) enthalten sind, folgt $H = H_0 + w$ (siehe z.B. /67, Satz 5.38/ oder /61, Vol.II, thm.X.23/).

q.e.d.

4. Abhängigkeit starker Lösungen vom inhomogenen Anteil φ_0

Stellen wir eine starke Lösung in der Form $\psi = \varphi_0 + \varphi$ dar

($\varphi_0 \in H_t^{(2)}(\Omega)$ mit $\mathcal{A}\varphi_0 + \partial_n \varphi_0 = b \in H_t^{(1/2)}(F)$), so ist der homogene Anteil φ bestimmt durch das Randwertproblem (2.141). Die rechte Seite ist hierbei als stetige Linearform auf $H_t^{(1)}(\Omega)$ gemäß

$$(A.5.52) \quad H_t^{(1)}(\Omega) \ni \chi \mapsto l(\chi) := \langle b | \text{tr} \chi \rangle_F - J_E(\varphi_0, \chi)$$

aufzufassen. Nach Stummel (/59, S.74/75, (6)-(8)/) hängt die Lösung φ von (2.141) für $E \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ stetig von l ab in dem Sinne, daß ein $c = c(\Omega, \vec{k}_y, E, w) > 0$ existiert mit

$$(A.5.53) \quad \|\varphi\|_{1,\Omega} \leq c \cdot \sup_{\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)} \frac{|l(\chi)|}{\|\chi\|_{1,\Omega}}.$$

Nun gilt aber nach (A.3.55) und Beh.4.1 (A.4.1)/(A.4.30) für alle $\chi \in H_t^{(1)}(\Omega)$

$$(A.5.54) \quad |\langle b | \text{tr} \chi \rangle_F| \leq \|b\|_{-1/2,F} \|\text{tr} \chi\|_{1/2,F} \leq k(\Omega, \vec{k}_y) \|b\|_{-1/2,F} \|\chi\|_{1,\Omega}$$

sowie nach (B1) (vgl. (A.4.31))

$$(A.5.55) \quad |J_E(\varphi_0, \chi)| \leq (1 + c(\Omega) \|w\|_2 + \alpha k(\Omega, \vec{k}_y)^2 + |E|) \|\varphi_0\|_{1,\Omega} \|\chi\|_{1,\Omega}$$

woraus die Abschätzung (2.164) folgt.

Anhang 6: Zur Konvergenz der approximativen Lösungen

Wir bringen das Randwertproblem (2.118) zunächst auf die Form

$$(A.6.1) \quad [\psi, \chi] - (E - \hat{E}) \langle \psi | \chi \rangle_{\Omega} = \langle b | \chi \rangle_F \quad \text{für alle } \chi \in H_t^{(1)}(\Omega),$$

wobei $[\dots]$ das energetische Skalarprodukt (2.131) bezeichnet. Dann sind die Eigenlösungen von (A.6.1) mit denen von (2.118) identisch und die Eigenwerte $\tilde{E}_j$ von (A.6.1) stehen mit denen von (2.118) in der Beziehung

$$(A.6.2) \quad \tilde{E}_j = E_j - \hat{E} \quad (j \in \mathbb{N}) \quad ;$$

für das diskrete Problem (2.179) gilt die analoge Aussage. Durch diese Verschiebung des Spektrums $\mathcal{G}$ in $\tilde{\mathcal{G}} = \mathcal{G} - \hat{E}$ bzw. $\tilde{\mathcal{G}}_N = \mathcal{G}_N - \hat{E}$ haben wir erreicht, daß wir statt der im allgemeinen indefiniten Sesquilinearform B nun das (positive) Skalarprodukt $[\dots]$ zu betrachten haben, womit wir uns unter Beachtung der Bedingung (B2') genau in der bei Chatelin & Lemordant (/76/) vorausgesetzten Situation befinden, was die Approximation von Eigenvektoren und Eigenwerten anbelangt. Die Konvergenzsätze (A1) und (A2) entsprechen /76, prop.2 und théorème/, wobei die detaillierte Form der Abschätzung der Eigenwerte einer Arbeit von Ciarlet et al. (/74, thm.3/) und die der Eigenlösungen einer Arbeit von Pierce & Varga (/75, thm.4.4/) zu entnehmen ist.

Zum Beweis des Konvergenzsatzes (A3) stellen wir für $E \notin \mathcal{G}$ und $b \in H_t^{(-1/2)}(F)$ neben dem Randwertproblem (A.6.1) und der entsprechenden diskreten Form, nämlich $\psi_b^{(N)} \in V_N$ zu finden mit

$$(A.6.3) \quad [\psi_b^{(N)}, \chi] = (E - \hat{E}) \langle \psi_b^{(N)} | \chi \rangle_{\Omega} + \langle b | \chi \rangle_F \quad \text{für alle } \chi \in V_N,$$

noch das folgende "Hilfsproblem": Finde $\bar{\psi}_b^{(N)} \in V_N$ mit

$$(A.6.4) \quad [\bar{\psi}_b^{(N)}, \chi] = (E - \hat{E}) \langle \psi_b | \chi \rangle_{\Omega} + \langle b | \chi \rangle_F \quad \text{für alle } \chi \in V_N,$$

wobei ψ_b die "exakte" Lösung (d.h. die Lösung von (A.6.1)) bezeichnet ^{a7)}.

a7) Da aus (A.6.1) und (A.6.4) sofort " $[\psi_b - \bar{\psi}_b^{(N)}, \chi] = 0$ für alle $\chi \in V_N$ " folgt, ist $\bar{\psi}_b^{(N)}$ nichts anderes als die Galerkin-Approximation $\Pi^{(N)} \psi_b$ von ψ_b ; vgl. Fußnote 28.

Da $E \notin \sigma$ ist, gibt es einen Index j_0 derart, daß gilt:

$$(A.6.5) \quad E_{j_0-1} < E < E_{j_0}$$

(hierbei sei $E_0 := -\infty$ gesetzt).

Aufgrund des Konvergenzsatzes (A1) können wir um die Energie E ein Intervall der Länge $4\delta(E) > 0$ mit der Eigenschaft

$$(A.6.6) \quad (E - 2\delta(E), E + 2\delta(E)) \subset (E_{j_0-1}, E_{j_0})$$

legen und ein $N_0 = N_0(E)$ finden, sodaß für alle $N \geq N_0$ keine der "approximativen" Energien $E_j^{(N)}$ mehr ins Intervall $(E - \delta(E), E + \delta(E))$ fallen kann. Insbesondere existieren dann für $N \geq N_0$ die diskreten Lösungen $\psi_b^{(N)}$ zu (A.6.3) und $\bar{\psi}_b^{(N)}$ zu (A.6.4). Wir vergewissern uns nun zunächst im folgenden Lemma über die Konvergenz der Hilfsfolge $(\bar{\psi}_b^{(N)})_{N \geq N_0}$ und schließen hieraus auf die Konvergenz von $(\psi_b^{(N)})_{N \geq N_0}$.

Lemma 6.1 (von Căea (/72/)): Unter der Voraussetzung (B7) gilt:

$$\bar{\psi}_b^{(N)} \rightarrow \psi_b \text{ für } N \rightarrow \infty \text{ in der } H_t^{(1)}(\Omega)\text{-Norm.}$$

Beweis:

Sei $(\chi_b^{(N)})_{N \geq N_0}$ eine Folge mit $\chi_b^{(N)} \in V_N$ und $\chi_b^{(N)} \rightarrow \psi_b$ in $H_t^{(1)}(\Omega)$.

Dann ist $[\psi_b - \bar{\psi}_b^{(N)}, \chi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}] = 0$ (man setze in (A.6.1) und (A.6.4)

$\chi := \chi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}$ und subtrahiere die letzte Gleichung von der ersten); somit gilt

$$(A.6.7) \quad \|\psi_b - \bar{\psi}_b^{(N)}\|^2 = [\psi_b - \bar{\psi}_b^{(N)}, \psi_b - \chi_b^{(N)}] \leq \|\psi_b - \bar{\psi}_b^{(N)}\| \cdot \|\psi_b - \chi_b^{(N)}\|$$

und damit

$$(A.6.8) \quad \|\psi_b - \bar{\psi}_b^{(N)}\| \leq \|\psi_b - \chi_b^{(N)}\| \rightarrow 0 \quad \text{für } N \rightarrow \infty$$

q.e.d.

Durch Vergleich von (A.6.3) mit (A.6.4) erhalten wir weiter die Beziehung

$$(A.6.9) \quad [\psi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}, \chi] = (E - \hat{E}) \langle \psi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)} | \chi \rangle_{\Omega} = (E - \hat{E}) \langle \bar{\psi}_b^{(N)} - \psi_b | \chi \rangle_{\Omega} \\ \text{für alle } \chi \in V_N,$$

Setzen wir hier für χ die bezüglich des Skalarproduktes [...] orthonormierten approximativen Eigenlösungen $\varphi_j^{(N)}$ ein, ergibt sich

$$(A.6.10) \quad [\psi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}, \varphi_j^{(N)}] = \frac{(E - \hat{E})(E_j^{(N)} - \hat{E})}{E_j^{(N)} - E} \langle \bar{\psi}_b^{(N)} - \psi_b | \varphi_j^{(N)} \rangle_{\Omega}.$$

Setzen wir $n := \dim(V_N)$, so ist $\varphi_1^{(N)}, \dots, \varphi_n^{(N)}$ eine Orthonormalbasis von $(V_N, [...])$ und ein Orthogonalsystem in $(L_2(\Omega), \langle . | . \rangle)$; wegen $\|\varphi_j^{(N)}\| = 1$ gilt hierbei:

$$(A.6.11) \quad \|\varphi_j^{(N)}\|_{L_2(\Omega)} = (E_j^{(N)} - \hat{E})^{-1/2} \quad (j = 1, \dots, n).$$

Damit ist

$$(A.6.12) \quad \begin{aligned} \|\psi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}\|^2 &= \sum_{j=1}^n |[\psi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}, \varphi_j^{(N)}]|^2 \leq \\ &\leq M(E, N) \cdot \sum_{j=1}^n \frac{|\langle \bar{\psi}_b^{(N)} - \psi_b | \varphi_j^{(N)} \rangle_{\Omega}|^2}{\|\varphi_j^{(N)}\|_{L_2(\Omega)}^2} \leq \\ &\leq M(E, N) \cdot \|\bar{\psi}_b^{(N)} - \psi_b\|_{L_2(\Omega)}^2, \end{aligned}$$

wobei

$$(A.6.13) \quad M(E, N) = (E - \hat{E})^2 \max_{1 \leq j \leq n} \left(\frac{E_j^{(N)} - \hat{E}}{(E_j^{(N)} - E)^2} \right)$$

Diese Konstante läßt sich nun abschätzen gemäß

Lemma 6.2: Für hinreichend große N ($N \geq N_0(E)$ wie oben erklärt) gilt:

$$(A.6.14) \quad M(E, N) \leq K(E) < \infty,$$

wobei (unter Bezug auf (A.6.6))

$$(A.6.15) \quad K(E) := \begin{cases} (E_{j_0} - \hat{E})^3 / \delta(E)^2 & \text{für } E \geq \hat{E} \\ (\hat{E} - E)/4 & \text{für } E < \hat{E} \end{cases}$$

Beweis: Die Funktion

$$(A.6.16) \quad f: \mathbb{R} \setminus \{E\} \rightarrow \mathbb{R}, \quad f(x) = \frac{x - \hat{E}}{(x - E)^2}$$

läßt sich für $E < \hat{E}$ abschätzen durch ihr Maximum $1/(4(\hat{E} - E))$, sodaß $M(E, N) \leq (\hat{E} - E)/4$. Im Falle $E \geq \hat{E}$ ist f nach oben zwar nicht beschränkt (vgl. Fig. A.6.1), nimmt aber auf $\mathbb{R} \setminus (E - \delta(E), E + \delta(E))$

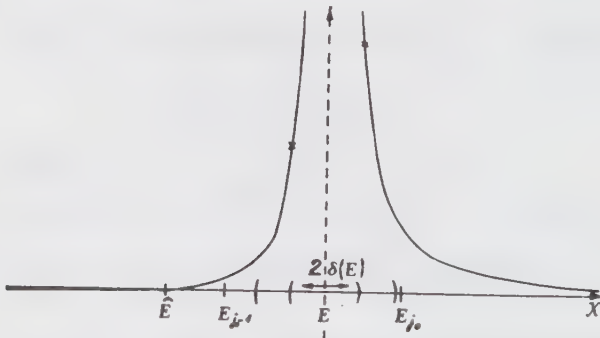


Fig. A.6.1

ihr Maximum an bei $x = E + \delta(E)$; es gilt:

$$(A.6.17) \quad f(E + \delta(E)) = (E - \hat{E} + \delta(E)) / \delta(E)^2 < (E_{j_0} - \hat{E}) / \delta(E)^2.$$

Da für $N \geq N_0(E)$ alle $E_j^{(N)}$ in $\mathbb{R} \setminus (E - \delta(E), E + \delta(E))$ liegen, folgt:

$$(A.6.18) \quad M(E, N) \leq (E - \hat{E})^2 f(E + \delta(E)) < (E_{j_0} - \hat{E})^3 / \delta(E)^2$$

q.e.d.

Somit haben wir die Abschätzung

$$(A.6.19) \quad |||\psi_b^{(N)} - \bar{\psi}_b^{(N)}||| \leq K(E)^{1/2} \|\bar{\psi}_b^{(N)} - \psi_b\|_{L_2(\Omega)},$$

und da nach dem Lemma von Céa $\bar{\psi}_b^{(N)}$ gegen ψ_b in $H_t^{(1)}(\Omega)$ und damit auch in $L_2(\Omega)$ konvergiert, folgt, daß $\psi_b^{(N)}$ und $\bar{\psi}_b^{(N)}$ sich nur um eine $H_t^{(1)}(\Omega)$ -Nullfolge unterscheiden, womit (A3) gezeigt ist.

q.e.d.

Anhang 7: Zur α -Abhängigkeit der Spektren des Einzelschichtproblems

1. Das Verhalten der Spektren für komplexe α .

Vergewissern wir uns zunächst, daß $(B_\alpha)_{\alpha \in \mathcal{R}}$ mit

$$(A.7.1) \quad \mathcal{R} := \mathbb{C} \setminus (-\infty, -\beta k^{-2}]$$

$$(\beta, k \text{ gemäß (A.4.35) bzw. (A.4.30)})$$

eine holomorphe Familie vom Typ (b) im Sinne von Reed & Simon (/61, Vol. IV, p.20/) ist:

Daß der Definitionsbereich $H_t^{(1)}(\Omega)$ von B_α unabhängig von α ist und $B_\alpha(\varphi, \varphi)$ für jedes $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ holomorph von α abhängt, ist klar, und daß B_α abgeschlossen ist, folgt aus der Tatsache, daß $\text{Re}(B_\alpha) = B_{\text{Re } \alpha}$ abgeschlossen ist für $\text{Re } \alpha > -\beta k^{-2}$ (vgl. S.63).

Es bleibt also nur noch nachzuweisen, daß für $\alpha \in \mathcal{R}$ die Form B_α strikt sektorförmig ist (vgl. /61, Vol. I, p.282/): Sei $\alpha = |\alpha|e^{i\gamma} \in \mathcal{R}$; dann ist $|\arg \alpha| = |\gamma| < \pi$ oder $|\alpha| < \beta k^{-2}$. Im zweiten Fall wissen wir bereits, daß B_α strikt sektorförmig ist (vgl. S.63); im ersten Fall setzen wir

$$(A.7.2) \quad C_\alpha := e^{-i\gamma/2} B_\alpha - \hat{E} e^{-i\gamma/2} \langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega.$$

Dann ist

$$(A.7.3) \quad \text{Re}(C_\alpha) = \cos(\gamma/2) (B_{|\alpha|} - \hat{E} \langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega),$$

$$(A.7.4) \quad \text{Im}(C_\alpha) = -\sin(\gamma/2) (B_{-|\alpha|} - \hat{E} \langle \cdot, \cdot \rangle_\Omega).$$

Da $\cos(\gamma/2) > 0$, ist $\text{Re}(C_\alpha) = \cos(\gamma/2) [\cdot, \cdot]$ äquivalent zum Skalarprodukt des energetischen Raumes $H_t^{(1)}(\Omega)$ und daher abgeschlossen, weswegen auch C_α abgeschlossen ist. Weil weiterhin für $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$ gilt

$$(A.7.5) \quad |\operatorname{Im} C_{\alpha}(\varphi, \varphi)| = \tan \frac{|\gamma|}{2} \cos \frac{|\gamma|}{2} |B_{-|\alpha|}(\varphi, \varphi) - \hat{E} \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2|$$

und wir wegen (2.122) die Abschätzung

$$(A.7.6) \quad |B_{-|\alpha|}(\varphi, \varphi) - \hat{E} \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2| \leq |B_{|\alpha|}(\varphi, \varphi) - \hat{E} \|\varphi\|_{L_2(\Omega)}^2|$$

haben, folgt für alle $\varphi \in H_t^{(1)}(\Omega)$

$$(A.7.7) \quad |\arg(C_{\alpha}(\varphi, \varphi))| \leq |\gamma|/2 < \pi/2, \quad ,$$

was zu zeigen war.

Die Familie $(B_{\alpha})_{\alpha \in \mathcal{R}}$ erzeugt eine Familie von Hamiltonoperatoren $(H_{\alpha})_{\alpha \in \mathcal{R}}$, die darstellbar sind als

$$(A.7.8) \quad H_{\alpha} = e^{i\gamma/2} K_{\alpha} + \hat{E} \cdot \operatorname{Id}, \quad D(H_{\alpha}) = D(K_{\alpha}),$$

wobei K_{α} den von der Form C_{α} (entsprechend dem 1. Darstellungssatz für Sesquilinearformen (/62, ch. VI, thm. 2.7/)) erzeugten Operator in $L_2(\Omega)$ bezeichnet. Die Eigenräume von H_{α} und K_{α} stimmen offenkundig überein und die Eigenwerte $E_j(\alpha)$ von H_{α} gehen aus den Eigenwerten $F_j(\alpha)$ von K_{α} durch eine Drehung und Translation der komplexen Ebene hervor:

$$(A.7.9) \quad E_j(\alpha) = e^{i \cdot \arg(\alpha)/2} \cdot F_j(\alpha) + \hat{E}.$$

Da nun aber $(C_{\alpha})_{\alpha \in \mathcal{R} \setminus \{0\}}$ ^{a8)} eine holomorphe Familie vom Typ (a) im Sinne von Kato (/62, ch. VII, §4.2/) ist, können wir aufgrund von (L8) folgern, daß die Operatoren H_{α} für alle $\alpha \in \mathcal{R}$ eine kompakte Resolvente und damit ein diskretes Spektrum von Eigenwerten endlicher Vielfachheit besitzen (/62, ch. VII, thm. 4.3 und ch. III, thm. 6.29/). Nach einem Satz von Kato & Rellich (/62, ch. VII, thm. 1.8;/61, Vol. IV, thm. XII.8/) ändert sich dieses Spektrum in folgender Weise holomorph mit α :

a8) Wegen $\gamma = \arg(\alpha)$ ist $\alpha = 0$ hier auszunehmen; das Verhalten bei $\alpha = 0$ ist jedoch ohnehin geklärt (vgl. S.63).

Für jedes $\alpha_0 \in \mathcal{R}$ besteht jede endliche Kollektion von Eigenwerten $E_j(\alpha)$ in einer Umgebung von α_0 aus Zweigen einer oder mehrerer analytischer Funktionen, die bei α_0 im schlimmsten Falle algebraische Singularitäten aufweisen; dasselbe gilt für die Eigenprojektoren. Ist $E_j(\alpha_0)$ ein nicht-entarteter Eigenwert, so ist es auch $E_j(\alpha)$ in einer Umgebung von α_0 . In diesem Fall kann man in der Nähe von α_0 den Eigenvektor $\varphi_j(\alpha)$ zu $E_j(\alpha)$ so wählen, daß $\alpha \mapsto \varphi_j(\alpha)$ eine $L_2(\Omega)$ -wertige analytische Funktion ist.

2. Das Verhalten der Schar $(H_\alpha)_{\alpha \gg 0}$ für $\alpha \rightarrow \infty$.

Wir können den nach Kato (/62, ch.VIII, §3.4/) existierenden Limes H_∞ dadurch genauer charakterisieren, daß wir die zugehörige hermitesche Sesquilinearform B_∞ identifizieren:

Beh.7.1: $D(B_\infty) = H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$ und für $\varphi, \chi \in D(B_\infty)$ gilt: $B_\infty(\varphi, \chi) = B_0(\varphi, \chi)$
(d.h. B_∞ ist die Einschränkung der Form B_0 auf $H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$).

Beweis:

Der Beweis entspricht einer Argumentation von Kato (/62, 2.Edition, p.575, 5./).

i) Wir zeigen: $H_{t,0}^{(1)}(\Omega) \subset D(B_\infty)$

Sei $\hat{H}_\infty$ der von $\tilde{B}_0$ (= Einschränkung von B_0 auf $H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$) erzeugte Hamiltonoperator. Da $\tilde{B}_0$ die monoton wachsende Folge $(B_{\alpha_n})_{n \in \mathbb{N}}$ (vgl. (2.204)-(2.206)) majorisiert, gilt für die Resolventen von H_{α_n} die Abschätzung (/62, ch.VI, thm.2.21/)

$$(A.7.10) \quad R(E, \hat{H}_\infty) \leq R(E, H_{\alpha_n}) \quad \text{für } n \in \mathbb{N}, E < \hat{E}.$$

Durch Übergang zum starken Resolventenlimes folgt

$$(A.7.11) \quad R(E, \hat{H}_\infty) \leq R(E, H_\infty) \quad \text{für } E < \hat{E},$$

was wiederum impliziert:

$$(A.7.12) \quad H_{t,0}^{(1)}(\Omega) = D(\tilde{B}_0) \subset D(B_\infty)$$

ii) Sei andererseits $\varphi \in D(B_\infty)$; wegen (2.209) ist dann

$\varphi \in D(B_{\alpha_n}) = H_t^{(1)}(\Omega)$ und wegen (2.210) gilt

$$(A.7.13) \quad B_\infty(\varphi, \varphi) = B_0(\varphi, \varphi) + \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n \|\varphi\|_{1/2, F}^2, \quad ,$$

sodaß wegen $\alpha_n \rightarrow \infty$ notwendigerweise $\text{tr } \varphi|_F = 0$ sein muß. Somit gehört

φ zu $H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$.

iii) Für $\varphi, \chi \in D(B_\infty) = H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$ gilt offenkundig:

$$(A.7.14) \quad B_\infty(\varphi, \chi) = \lim_{n \rightarrow \infty} B_{\alpha_n}(\varphi, \chi) = B_0(\varphi, \chi)$$

q.e.d.

Anhang 8: Ableitung der Stromsummenregel

Wir benutzen als Basis des Raumes der propagierenden Blochwellen die Vektoren $\tilde{b}^{(\lambda)}$ gemäß Gl.(3.153), wobei wir diese durch Umindizieren in der Form $\tilde{b}^{(1)}, \dots, \tilde{b}^{(p)}$ derart anordnen, daß für $\lambda = 1, \dots, \tau$ in der Transformationsgleichung (3.153) die Eigenvektoren $(\beta_Z)_\lambda$ von $\mathcal{G}_Z^{(0)}$ zu den positiven Strömen I_λ auftreten und für $\lambda = \tau+1, \dots, p$ die zu den negativen Strömen. Da man bei dieser Transformation nur über Blochwellen $b^{(\mu)}$ mit demselben, die jeweilige Äquivalenzklasse Z charakterisierenden Übertragungsfaktor $t_\perp^{(\mu)} = t_\perp(Z)$ summiert, wird dadurch nur eine Basistransformation im zu $t_\perp(Z)$ gehörenden Eigenraum vermittelt, sodaß alle Beziehungen in Abschnitt 3.2.3 richtig bleiben, wenn man $b_n^{(\mu)}$ durch $\tilde{b}_n^{(\mu)}$ ersetzt. Allerdings vereinfacht sich die Dualitätsbeziehung (3.107) zu

$$(A.8.1) \quad \langle \tilde{d}_n^{(\nu)} | \tilde{b}_n^{(\mu)} \rangle_F = I_\mu \delta_{\nu\mu} .$$

Wegen der Beschränktheit der Folge $(\tilde{b}_n^{(\mu)})_{n \in \mathbb{N}}$ kann somit insbesondere $(\tilde{d}_n^{(\mu)})_{n \in \mathbb{N}}$ nicht gegen Null streben.

Wir stellen nun zunächst fest, daß es wenigstens ein Paar von Strömen I_μ mit verschiedenem Vorzeichen geben muß: Die Stromoperatoren $\mathcal{G}^{(n)}$ gehören für hinreichend große n zur Spurklasse (/67, §7.1, Satz 7.12/) und aus Def. (3.104) schließt man auf

$$(A.8.2) \quad \text{sp}(\mathcal{G}^{(n)}) = 0 .$$

Eine ähnliche Argumentation wie in Abschnitt 3.2.3 zeigt das Verschwinden der Spur von $\mathcal{G}_{ev}^{(n)}$ im Limes $n \rightarrow \infty$, sodaß gilt:

$$(A.8.3) \quad 0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \text{sp}(\mathcal{G}_p^{(n)}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\mu=1}^p (I_\mu)^{-1} \|\tilde{d}_n^{(\mu)}\|_{L_2(F)}^2$$

Hätten alle Ströme I_μ dasselbe Vorzeichen, müßten die Folgen $(\tilde{d}_n^{(\mu)})_{n \in \mathbb{N}}$ gegen Null gehen im Widerspruch zu (A.8.1).

Als nächstes überzeugen wir uns davon, daß die Dimension $\mathfrak{G}$ von $L_{ev}^{(n)\perp} = \text{span} \{ \tilde{s}_n^{(1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(p)} \}$ (mit $\tilde{s}_n^{(\nu)} := P_L \tilde{d}_n^{(\nu)}$) nicht größer ist als τ ⁵¹⁾, die Anzahl der positiven Ströme. Hierzu orthonormalisieren wir die Vektoren $\tilde{s}_n^{(\nu)}$, mit $s_n^{(1)}$ beginnend, nach dem Schmidtschen Verfahren (/67, §3.2/) in der Reihenfolge aufsteigender Indizes ν , wobei diejenigen $\tilde{s}_n^{(\nu)}$ übergegangen werden, welche bereits in der linearen Hülle der vorstehenden Vektoren $\tilde{s}_n^{(1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(\nu-1)}$ enthalten sind. Die so erhaltene Orthonormalbasis $e_n^{(1)}, \dots, e_n^{(\mathfrak{G})}$ von $L_{ev}^{(n)\perp}$ hat dann die Eigenschaft

$$(A.8.4) \quad e_n^{(j)} \perp \{ \tilde{s}_n^{(1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(\nu_j)} \} \quad (j = 1, \dots, \mathfrak{G}) ,$$

wobei $\nu_j - j + 1$ die Zahl der beim Orthonormalisierungsprozeß ausgelassenen $\tilde{s}_n^{(\nu)}$ bezeichnet. Nehmen wir nun an, es wäre $\mathfrak{G} \geq \tau + 1$; dann gilt jedenfalls

$$(A.8.5) \quad e_n^{(j)} \perp \{ \tilde{s}_n^{(1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(\tau)} \}$$

für $j = \tau + 1, \dots, \mathfrak{G}$.

Nun ist aber

$$(A.8.6) \quad \langle e_n^{(j)} | P_L \mathcal{Q}^{(n)} P_L^* | e_n^{(j)} \rangle_Z = 0 ,$$

sodaß wegen (3.130) für $j = \tau + 1, \dots, \mathfrak{G}$ folgt:

$$(A.8.7) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\mu=\tau+1}^p (I_\mu)^{-1} | \langle e_n^{(j)} | \tilde{s}_n^{(\mu)} \rangle_Z |^2 =$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle e_n^{(j)} | P_L \mathcal{Q}_p^{(n)} P_L^* | e_n^{(j)} \rangle_Z = 0$$

Da alle Ströme $I_{\tau+1}, \dots, I_p$ negativ sind, konvergiert somit für $j = \tau + 1, \dots, \mathfrak{G}$ und $\mu = \tau + 1, \dots, p$ jede Folge $(\langle e_n^{(j)} | \tilde{s}_n^{(\mu)} \rangle_Z)_{n \in \mathbb{N}}$ für sich gegen Null. Die Orthogonalprojektoren

$$(A.8.8) \quad Q_+^{(n)} := \sum_{j=1}^{\tau} | e_n^{(j)} \rangle \langle e_n^{(j)} |$$

$$(A.8.9) \quad Q_-^{(n)} := \sum_{j=\tau+1}^{\mathfrak{G}} | e_n^{(j)} \rangle \langle e_n^{(j)} |$$

haben demzufolge die Eigenschaften :

$$(A.8.10) \quad Q_p^{(n)} = Q_+^{(n)} + Q_-^{(n)}$$

$$(A.8.11) \quad Q_+^{(n)} \tilde{s}_n^{(\mu)} = \tilde{s}_n^{(\mu)} \quad \text{und} \quad Q_-^{(n)} \tilde{s}_n^{(\mu)} = 0 \quad \text{für} \quad \mu = 1, \dots, \tau$$

$$(A.8.12) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} Q_-^{(n)} \tilde{s}_n^{(\mu)} = 0 \quad \text{für} \quad \mu = \tau + 1, \dots, p, \quad ,$$

$$(A.8.13) \quad Q_+^{(n)} u = Q_-^{(n)} u = 0 \quad \text{für} \quad u \in L_{ev}^{(n)}$$

Beachtet man, daß für hinreichend große n die Dimension von $R(Q_p^{(n)})$ konstant ist, so folgt $\dim R(Q_p^{(n)}) = \dim R(Q_+^{(n)})$, also $\sigma \leq \tau$ im Widerspruch zur Annahme $\sigma \geq \tau + 1$.

Analog zeigt man, daß σ nicht größer ist als $p - \tau$, die Zahl der negativen Ströme; also gilt

$$(A.8.14) \quad \sigma \leq \min \{ \tau, p - \tau \} \quad ,$$

insbesondere

$$(A.8.15) \quad 2\sigma \leq p \quad .$$

Dieselben Argumente lassen sich natürlich auch bezüglich des von den "rechten" Komponenten $\tilde{r}_n^{(\mu)}$ von $\tilde{d}_n^{(\mu)} = (\tilde{r}_n^{(\mu)}, \tilde{s}_n^{(\mu)})^T$ aufgespannten Raumes $\text{span} \{ \tilde{r}_n^{(1)}, \dots, \tilde{r}_n^{(p)} \} =: R_{ev}^{(n)\perp}$ anführen; bezeichnet ϱ dessen Dimension, so ist ebenfalls

$$(A.8.16) \quad \varrho \leq \min \{ \tau, p - \tau \} ; \quad 2\varrho \leq p \quad .$$

Andererseits ist die Dimension von $\text{span} \{ \tilde{d}_n^{(1)}, \dots, \tilde{d}_n^{(p)} \} = H_{ev}^{(n)\perp}$ aufgrund der linearen Unabhängigkeit der $\tilde{d}_n^{(\mu)}$ gleich p und jedenfalls nicht größer als die Summe der Dimensionen der Projektionen $L_{ev}^{(n)\perp} = P_L H_{ev}^{(n)\perp}$ und $R_{ev}^{(n)\perp} = P_R H_{ev}^{(n)\perp}$:

$$(A.8.17) \quad p \leq g + g \quad .$$

Diese Ungleichung zusammen mit (A.8.15) und (A.8.16) führt auf

$$(A.8.18) \quad p = 2g \quad \text{und} \quad g = g \quad ;$$

durch Einsetzen in (A.8.14) folgt schließlich

$$(A.8.19) \quad \tau = g = p/2 \quad .$$

Zuletzt wollen wir uns noch über die lineare Unabhängigkeit sowohl der Vektoren $\tilde{s}_n^{(1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(\tau)}$ als auch der Vektoren $\tilde{s}_n^{(\tau+1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(2\tau)}$ vergewissern:

Sei also $\sum_{\nu=1}^{\tau} \alpha_{\nu} \tilde{s}_n^{(\nu)} = 0$ vorausgesetzt. Die Dualitätsbeziehung (A.8.1)

läßt sich schreiben in der Form

$$(A.8.20) \quad \langle \tilde{b}_{n,L}^{(\mu)} | \tilde{s}_n^{(\nu)} \rangle_Z + \langle \tilde{s}_n^{(\mu)} | \tilde{b}_{n,L}^{(\nu)} \rangle_Z = I_{\mu} \delta_{\mu\nu} \quad ;$$

durch Multiplikation mit α_{ν} und α_{μ}^* und Summation über $\mu, \nu = 1, \dots, \tau$ erhält man

$$(A.8.21) \quad 0 = \sum_{\nu=1}^{\tau} I_{\nu} |\alpha_{\nu}|^2 \quad .$$

Wegen des positiven Vorzeichens der Ströme $I_1, \dots, I_{\tau}$ folgt $\alpha_{\nu} = 0$ für $\nu = 1, \dots, \tau$, womit die lineare Unabhängigkeit von $\tilde{s}_n^{(1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(\tau)}$ gezeigt ist; das Vorgehen bei $\tilde{s}_n^{(\tau+1)}, \dots, \tilde{s}_n^{(2\tau)}$ ist analog. Mithin stellen beide Sätze von Vektoren eine Basis von $L_{ev}^{(n)\perp}$ dar.

Literaturverzeichnis

- /1/ Prutton, M.: Surface physics (Oxford: Clarendon Press, 1975)
- /2/ Somorjai, G.A.; Van Hove, M.A.: In "Structure and Bonding", Vol.38, ch.V (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1979)
- /3/ Fong, C.Y.; Schlüter, M.: In "Electrons and Phonons in Layered Crystal Structures (Eds.: Wieting, T.J. und Schlüter, M.), Vol.3, ch.C (Dordrecht: D. Reidel, 1979)
- /4/ García-Moliner, F.; Flores, F.: Introduction to the Theory of Solid Surfaces (Cambridge: University Press, 1979)
- /5/ Bross, H.: J. Phys. F: Met. Phys. 12, 2883 (1982)
- /6/ Tamm, I.: Z. Phys. 76, 849 (1932)
- /7/ Shockley, W.: Phys. Rev. 56, 317 (1939)
- /8/ Heine, V.: Proc. Phys. Soc. 81, 300 (1963)
- /9/ Pendry, J.B.; Forstmann, F.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 3, 59 (1970)
- /10/ Forstmann, F.: Z. Phys. 235, 69 (1970)
- /11/ Forstmann, F.; Pendry, J.B.: Z. Phys. 235, 75 (1970)
- /12/ Forstmann, F.; Heine, V.: Phys. Rev. Lett. 24, 1419 (1970)
- /13/ Gurmman, S.J.; Pendry, J.B.: Phys. Rev. Lett. 31, 637 (1973)
- /14/ Henzler, M.: In "Electron Spectroscopy for Surface Analysis" (Ed.: Ibach, H.), ch.4 (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1977)
- /15/ Kirschner, J.: ibidem, ch.3.4
- /16/ Froitzheim, H.: ibidem, ch.6
- /17/ Feuerbacher, B.; Fitton, B.: ibidem, ch.5
- /18/ Smith, N.V.: In "Photoemission in Solids" (Eds.: Cardona, M. und Ley, L.), Vol.I, ch.6 (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1978)
- /19/ Dose, V.: Prog. Surf. Sci. 13, 225 (1983)
- /20/ Bullett, D.W.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 11, 4501 (1978)
- /21/ Bullett, D.W.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 14, 4521 (1981)

- /22/ Lafon, E.E.; Chaney, R.C.; Chun, C.L.: In "Computational Methods in Band Theory" (Eds.: Marcus, P.M.; Janak, J.F.; Williams, A.R.), pp.284-295 (New York, London: Plenum Press, 1971)
- /23/ Appelbaum, J.A.; Hamann, D.R.: Solid State Comm. 27, 881 (1978)
- /24/ Euceda, A.; Bylander, D.M.; Kleinman, L.; Kenneth, M.: Phys. Rev. B27, 659 (1983)
- /25/ Andersen, O.K.; Kasowski, R.V.: Phys. Rev. B4, 1064 (1971)
- /26/ Andersen, O.K.: Phys. Rev. B12, 3060 (1975)
- /27/ Kasowski, R.V.: Solid State Comm. 17, 179 (1975)
- /28/ Jepsen, O.; Madsen, J.; Andersen, O.K.: Phys. Rev. B18, 605 (1978)
- /29/ Krakauer, H.; Posternak, M.; Freeman, A.J.: Phys. Rev. B19, 1706 (1979)
- /30/ Marcus, P.M.; Jepsen, D.W.: Phys. Rev. Lett. 20, 925 (1968)
- /31/ Jepsen, D.W.; Marcus, P.M.: In "Computational Methods in Band Theory" (Eds.: Marcus, P.M.; Janak, J.F.; Williams, A.R.), pp.416-443 (New York, London: Plenum Press, 1971)
- /32/ Appelbaum, J.A.; Hamann, D.R.: Phys. Rev. B6, 2166 (1972)
- /33/ McRae, E.G.: Surf. Sci. 11, 479 (1968)
- /34/ Jepsen, D.W.: Phys. Rev. B22, 5701 (1980)
- /35/ Spanjaard, D.; Jepsen, D.W.; Marcus, P.M.: Phys. Rev. B19, 642 (1979)
- /36/ Wachutka, G.: Diplomarbeit LMU München (1978)
- /37/ Holzwarth, N.A.W.; Lee, M.J.G.: Phys. Rev. B18, 5350 (1978)
- /38/ v. Laue, M.: Phys. Rev. 37, 53 (1931)
- /39/ Wachutka, G.: Verhandl. DPG(VI), 19, 340 (1984)
- /40/ Loucks, T.: Augmented Plane Wave Method (New York: Benjamin, 1967)
- /41/ Kambe, K.: Z. Naturforschg. 22a, 422 (1967)
- /42/ Kambe, K.: ibidem, 322 (1967)
- /43/ Kambe, K.: Z. Naturforschg. 23a, 1280 (1968)
- /44/ Pendry, J.B.: Low Energy Electron Diffraction (London, New York: Academic Press, 1974)

- /45/ Van Hove, M.A.; Tong, S.Y.: Surface Crystallography by LEED (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1979)
- /46/ Hora, R.; Scheffler, M.: Phys. Rev. B29, 692, (1984)
- /47/ Tamura, E.; Feder, R.: Verhandl. DPG(VI), 18, 801 (1983)
- /48/ Kittel, Ch.: Einführung in die Festkörperphysik (München, Wien: Oldenbourg, 1968)
- /49/ Ljubarski, G.J.: Anwendungen der Gruppentheorie in der Physik, §29 (Berlin: Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1962)
- /50/ Carslaw, H.S.; Jaeger, J.C.: Conduction of Heat in Solids, pp.13-14 (Oxford: Clarendon, 1947)
- /51/ Wachutka, G.; Bross, H.: J. Phys. A: Math. Gen. 15, 3083 (1982)
- /52/ Courant, R.; Hilbert, D.: Methoden der Mathematischen Physik I + II, 2. Aufl. (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1968)
- /53/ Mikhlin, S.G.: Mathematical Physics, an Advanced Course (Amsterdam, London: North-Holland, 1970)
- /54/ Nečas, J.: Les méthodes directes en théorie des équations elliptiques (Prag: Academia, 1967)
- /55/ Agmon, S.: Lectures on Elliptic Boundary Value Problems (Princeton, New Jersey: Van Nostrand, 1965)
- /56/ Riesz, F.; Sz.-Nagy, B.: Vorlesungen über Funktionalanalysis (Berlin: Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1956)
- /57/ Yosida, K.: Functional Analysis (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1971)
- /58/ Lions, J.L.; Magenes, E.: Non-Homogeneous Boundary Value Problems and Applications (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1972)
- /59/ Stummel, F.: Rand- und Eigenwertaufgaben in Sobolewschen Räumen (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1969)
- /60/ Bers, L.; John, F.; Schechter, M.: Partial Differential Equations, part II, ch.3 (New York, London, Sydney: John Wiley & Sons, 1964)
- /61/ Reed, M.; Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics (New York, London: Academic Press, 1972)

- /62/ Kato, T.: Perturbation Theory for Linear Operators
(New York: Springer, 1966)
- /63/ Lions, J.L.: In "Boundary Value Problems for Linear Evolution
Partial Differential Equations" (Ed.: Garnir, H.G.), pp.175-238
(Dordrecht: D. Reidel, 1977)
- /64/ Appelbaum, J.A.; Hamann, D.R.: Rev. Mod. Phys. 48, 479 (1976)
- /65/ Morse, P.M.; Feshbach, H.: Methods of Theoretical Physics,
Part I, §6.2, p.702 (New York, Toronto, London: McGraw-Hill, 1953)
- /66/ Ladyženskaja, O.A.: Linear and quasilinear elliptic equations,
ch.2, §2, equ.(2.19) (New York, London: Academic Press, 1968)
- /67/ Weidmann, J.: Lineare Operatoren in Hilberträumen
(Stuttgart: Teubner, 1976)
- /68/ Smith, K.T.: Bull. Amer. Math. Soc. 67, 368 (1961)
- /69/ Schwartz, L.: Ann. Inst. Fourier 7, 1 (1957); 8, 1 (1958)
- /70/ Schwartz, L.: Théorie des distributions, Vol.II, ch.VII, §1
(Paris: Hermann, 1957)
- /71/ Dieudonné, J.: Grundzüge der modernen Analysis, §8.1
(Braunschweig: Vieweg, 1972)
- /72/ Cêa, J.: Ann. Inst. Fourier 14, 345 (1964)
- /73/ Ciarlet, P.G.: The Finite Element Method for Elliptic Problems, ch.2
(Amsterdam, New York, Oxford: North-Holland, 1978)
- /74/ Ciarlet, P.G.; Schultz, M.H.; Varga, R.S.: Numer. Math. 12, 120 (1968)
- /75/ Pierce, J.G.; Varga, R.S.: SIAM J. Numer. Anal. 9, 137 (1972)
- /76/ Chatelin, F.; Lemordant, M.J.: Numer. Math. 23, 215 (1975)
- /77/ Hellmann, H.: Einführung in die Quantenchemie, §54 (Leipzig, Wien:
Deuticke, 1937)
- /78/ Feynman, R.P.: Phys. Rev. 56, 340 (1939)
- /79/ Odeh, F.; Keller, J.B.: J. Math. Phys. 5, 1499 (1964)
- /80/ Avron, J.; Grossmann, A.; Rodriguez, R.: Rep. Math. Phys. 5,
113 (1974)
- /81/ Troianello, G.M.: J. Math. Phys. 15, 2048 (1974)

- /82/ Avron, J.E.; Simon, B.: Ann. Phys. 110, 85 (1978)
- /83/ Wannier, G.H.: Elements of Solid State Theory, pp.144-147
(Cambridge: University Press, 1959)
- /84/ Eastham, M.S.P.: The Spectral Theory of Periodic Differential Equations
(Edinburgh, London: Scottish Academic Press, 1973)
- /85/ Blount, E.I.: In "Solid State Physics" (Eds.: Seitz, F.; Turnbull, D.),
Vol.13, pp.305-373 (New York, London: Academic Press, 1962)
- /86/ Kohn, W.: Phys. Rev. 115, 809 (1959)
- /87/ Jones, H.: The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in
Crystals (Amsterdam: North-Holland, 1960)
- /88/ Koster, G.F.: In "Solid State Physics" (Eds.: Seitz, F.; Turnbull, D.),
Vol.5, pp.173-256 (New York: Academic Press, 1957)
- /89/ Herring, C.: Phys. Rev. 52, 361 (1937)
- /90/ Herring, C.: Phys. Rev. 52, 365 (1937)
- /91/ Cornwell, J.F.: Group Theory and Electronic Energy Bands in Solids
(Amsterdam, London: North-Holland, 1969)
- /92/ Moler, C.B.; Stewart, G.W.: SIAM J. Numer. Anal. 10, 241 (1973)
- /93/ Ward, R.C.: Technical Note NASA TN D-7305 (1973)
- /94/ Kaufmann, L.C.: ACM TOMS 1, 271 (1975)
- /95/ Wilkinson, J.H.: National Physical Laboratory Report DNACS 10/78 (1978)
- /96/ Fong, C.Y.: In "Electrons and Phonons in Layered Crystal Structures"
(Eds.: Wieting, T.J. und Schlüter, M.), Vol.3, ch.B (Dordrecht:
D. Reidel, 1979)
- /97/ Marcus, P.M.; Janak, J.F.; Williams, A.R. (Eds.): Computational
Methods in Band Theory (New York, London: Plenum Press, 1971)
- /98/ Mattheiss, L.F.: Phys. Rev. B8, 3719 (1973) und hierin zitierte
Arbeiten des Autors
- /99/ Robertson, J.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 12, 4753 (1979)
- /100/ Hind, S.P.; Lee, P.M.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 349 (1980)
- /101/ Šimůnek, A.; Wiech, G.: Phys. Rev. B30, 923 (1984)

- /102/ Bross, H.: Z. Phys. B28, 173 (1977)
- /103/ Pendry, J.B.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 4, 2501 (1971)
- /104/ Wood, K.; Pendry, J.B.: Phys. Rev. Lett. 31, 1400 (1973)
- /105/ Watts, C.M.K.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 1, 1237 (1968); 2, 966 (1969); 3, 1483 (1970)
- /106/ Kerre, E.; Phariseau, P.: Physica (Utr.) 46, 411 (1970)
- /107/ Shen, A.P.: Phys. Rev. B3, 4200 (1971); 4, 382 (1971)
- /108/ Jepsen, D.W.; Marcus, P.M.; Jona, F.: Phys. Rev. B5, 3933 (1972)
- /109/ Nicolaou, N.; Modinos, A.: Phys. Rev. B11, 3687 (1975); 13, 1536 (1976)
- /110/ Ignatiev, A.; Jona, F.; Shih, H.D.; Jepsen, D.W.; Marcus, P.M.: Phys. Rev. B11, 4787 (1975)
- /111/ Noguera, C.; Spanjaard, D.; Jepsen, D.W.: Phys. Rev. B17, 607 (1978)
- /112/ Jepsen, D.W.: Phys. Rev. B20, 402 (1979)
- /113/ Kambe, K.: In "Computational Methods in Band Theory" (Eds.: Marcus, P.M.; Janak, J.F.; Williams, A.R.), pp.409-415 (New York, London: Plenum Press, 1971)
- /114/ Großmann, S.: Funktionalanalysis, (Frankfurt/M.: Akademische Verlagsgesellschaft, 1970)
- /115/ Jepsen, D.W.; Marcus, P.M.; Jona, F.: Phys. Rev. B6, 3684 (1972)
- /116/ Appelbaum, J.A.; Blount, E.I.: Phys. Rev. B8, 483 (1973)
- /117/ Slater, J.C.: Phys. Rev. 51, 151 (1937)
- /118/ Abramowitz, M.; Stegun, I.A.: Handbook of Mathematical Functions (New York: Dover Publications, 1965)
- /119/ Luke, Y.L.: The Special Functions and Their Approximations (New York, London: Academic Press, 1969)
- /120/ Gradshteyn, I.S.; Ryzhik, I.M.: Table of Integrals, Series and Products (New York, London: Academic Press, 1965)
- /121/ Stoer, J.: Einführung in die Numerische Mathematik (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1972)

- /122/ Chadi, D.J.; Cohen, M.L.: Phys. Rev. B8, 5747 (1973)
- /123/ Cunningham, S.L.: Phys. Rev. B10, 4988 (1974)
- /124/ Monkhorst, H.J.; Pack, J.D.: Phys. Rev. B13, 5188 (1976)
- /125/ Mac Donald, A.H.: Phys. Rev. B18, 5897 (1978)
- /126/ Bross, H.: J. Phys. F: Met. Phys. 8, 2631 (1978)
- /127/ Bunch, J.R.; Parlett, B.N.: SIAM J. Numer. Anal. 8, 639 (1971)
- /128/ Hart, J.F.: Computer Approximations (New York, London, Sydney: John Wiley & Sons, 1968)
- /129/ Gautschi, W.: Comm. ACM 7, 479 (1964)
- /130/ Akima, H.: JACM 17, 589 (1970)
- /131/ Tong, S.Y.; Van Hove, M.A.: Phys. Rev. B16, 1459 (1977)
- /132/ Clauberg, R.: Phys. Rev. B27, 4644 (1983)
- /133/ Stöhr, H.; Bross, H.: Surf. Science 124, 99 (1983)
- /134/ Stöhr, H.: Unveröffentlichte Rechnung (1981)
- /135/ Wilkinson, J.H.: Singular-Value Decomposition - Basic Aspects, in "Numerical Software - Needs and Availability" (Ed.: Jacobs, D.A.H.; New York, London: Academic Press, 1978)
- /136/ Smith, J.R.; Gay, J.G.; Arlinghaus, F.J.: Phys. Rev. B21, 2201 (1980)
- /137/ Snow, E.C.: Phys. Rev. 158, 683 (1967)
- /138/ Chodorow, M.I.: Ph. D. Thesis (M.I.T, 1939), non vidi
- /139/ Burdick, G.A.: Phys. Rev. 129, 138 (1963)
- /140/ Faulkner, J.S.: Phys. Rev. 178, 914 (1969)
- /141/ Gartland, P.O.; Slagsvold, B.J.: Solid State Comm. 25, 489 (1978)
- /142/ Gartland, P.O.; Slagsvold, B.J.: Phys. Rev. B12, 4047 (1975)
- /143/ Gurmman, S.J.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 9, L609 (1976)
- /144/ Stöhr, J.; Wehner, P.S.; Williams, R.S.; Apai, G.; Shirley, D.A.: Phys. Rev. B17, 587 (1978)
- /145/ Heimann, P.; Hermanson, J.; Miosga, H.; Neddermeyer, H.: Phys. Rev. B20, 3059 (1979)

- /146/ Louis, E.; Vêrges, J.A.: J. Phys. F: Metal Phys. 10, 207 (1980)
- /147/ Durham, P.; Kar, N.: Surf. Science 111, L648 (1981)
- /148/ Westphal, D.; Goldmann, A.: Surf. Science 131, 92 (1983)
- /149/ Altmann, W.; Dose, V.; Goldmann, A.; Kolac, U.; Rogozik, J.: Phys. Rev. B29, 3015 (1984)
- /150/ Dose, V.; Kolac, U.; Borstel, G.; Thörner, G.: Phys. Rev. B29, 7030 (1984)
- /151/ Knapp, J.A.; Himpfel, F.J.; Eastman, D.E.: Phys. Rev. B19, 4952 (1979)
- /152/ Thiry, P.; Chandesris, D; Lecante, J.; Guillot, C.; Pinchaux, R.; Pétroff, Y.: Phys. Rev. Lett. 43, 82 (1979)
- /153/ Pétroff, Y.; Thiry, P.: Applied Optics 19, 3957 (1980)
- /154/ Thörner, G.; Borstel, G.: Solid State Comm. 47, 329 (1983)
- /155/ Janak, J.F.; Williams, A.R.; Moruzzi, V.L.: Phys. Rev. B11, 1522 (1975)
- /156/ Moruzzi, V.L.; Williams, A.R.; Janak, J.F.: Calculated Electronic Properties of Metals (New York: Pergamon Press, 1978)
- /157/ Michaelson, H.B.: J. Appl. Phys. 48, 4729 (1977)
- /158/ Lang, N.D.; Kohn, W.: Phys. Rev. B1, 4555 (1970)
- /159/ Eckart, C.: Phys. Rev. 35, 1303 (1930)
- /160/ Szmulowicz, F.; Segall, B.: Phys. Rev. B24, 892 (1981)
- /161/ Greisen, F.C.: phys. stat. sol. 25, 753 (1968)
- /162/ Bross, H.: Phys. Kond. Mat. 3, 119 (1964)
- /163/ Bross, H.; Bohn, G.; Meister, G.; Schubö, W.; Stöhr, H.: Phys. Rev. B2, 3098 (1970)
- /164/ Bross, H.: Verhandl. DPG 11, 621 (1976)
- /165/ Betz, M.E.: Diplomarbeit LMU München (1976)
- /166/ Schiekkel, F.B.: Dissertation LMU München (1984)
- /167/ Bross, H.: Unveröffentlichte Rechnungen (Al 1975/1984; Cu 1979/1984)
- /168/ Maue, A.W.: Z. Phys. 94, 717 (1935)

- /169/ Echenique, P.M.; Pendry, J.B.: J. Phys. C: Solid St. Phys. 11, 2065 (1978)
- /170/ Pendry, J.B.; Gurman, S.J.: Surf. Science 49, 87 (1975)
- /171/ Hansson, G.V.; Flodström, S.A.: Phys. Rev. B18, 1562 (1978)
- /172/ Levinson, H.J.; Greuter, F.; Plummer, E.W.: Phys. Rev. B27, 727 (1983)
- /173/ Kevan, S.D.: Phys. Rev. B28, 2268 (1983)
- /174/ Johnson, P.D.; Smith, N.V.: Phys. Rev. B27, 2527 (1983)
- /175/ Arlinghaus, F.J.; Gay, J.G.; Smith, J.R.: In "Topics in Current Physics" (Ed.: Smith, J.R.), pp. 71-114 (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1980)
- /176/ Caruthers, E.; Kleinman, L.; Alldredge, G.P.: Phys. Rev. B8, 4570 (1973)
- /177/ Kasowski, R.V.: Phys. Rev. Lett. 33, 83 (1974)
- /178/ Dempsey, D.G.; Kleinman, L.: Phys. Rev. B16, 5356 (1977)
- /179/ Straub, D.; Himpfel, F.J.: Phys. Rev. Lett. 52, 1922 (1984)

Lexikon der verwendeten Symbole

	Seite		Seite
A	23	d	68
$A^{(n)}$	105	$d_n^{(\nu)}$	110
$\underline{A}(E, \vec{k}_n)$	134	$\overline{\Delta}$	20,21
$A(z)$	28	$\delta_{\mu\nu}$ } Kroneckersches	
$\vec{a}_3, \vec{a}_{3\parallel}, \vec{a}_{3\perp}$	68,69	$\delta_{gg'}$ } Deltasymbol	
$B(\varphi, \chi), B_\alpha$	40,60	δJ erste Variation von J	
B_0, B_∞	64,65	∂M Rand der Menge M	
$B_{\vec{k}}$	70	$\partial_n^\alpha u_j$	21
BZ_1	14	$\partial_n^\alpha \psi_j, \partial_n^\alpha \psi_\chi$	17
BZ_1	68	$\hat{E}$	221
BZ_1^C	74	$E_0(\vec{k}_n), E_0$	22
b, b_R, b_L	10	$E_j^{SS}(\vec{k}_n)$	129
$b_{\vec{k}}$	86	$E_\nu^\mu(\vec{k}_n), E_\nu^\mu$	142
$b_n^{(\nu)}$	108	$\vec{e}_z$	10
$\mathbb{C}$ komplexe Zahlen		$\varepsilon_j(\vec{k})$	71
$\mathcal{C}^\infty(\overline{\Omega})$	16	F	40
$\mathcal{C}_0^\infty(\Omega)$ $\mathcal{C}^\infty$ -Fkt. mit komp. Träger		$\mathcal{F}$	196,208
$C_{\vec{k}}$	86	$F_{k,0}, F_{k,1}$	16,68
$D(H)$ Definitionsbereich des Operators H		F_R, F_L	16
$D^{\alpha\psi}$	19	$\vec{G}$ Vektor aus G_3^*	
DJ Differential von J		$\mathcal{J}, \mathcal{J}_{\vec{k}_*}$	77
$D_{\mu\nu}(E, \vec{k}, z)$	139	$\overline{\mathcal{J}}_{\vec{k}_*}$	125
$\mathcal{D}_t(Z)$	25	G_E	42
		$\hat{G}_E$	47
		$G_E^{(N)}$	97

	Seite		Seite
$G_E, \vec{k}_E$	51	$I_n(x)$	163
G_{XY}	87	$\mathcal{G}_{Z^\mu}^{(0)}$	111
$\underline{G}_{XY}$	161	$J(\varphi), J$	52
$\mathcal{G}^{(n)}$	110	$\tilde{J}(\psi), \tilde{J}$	54
$\mathcal{G}_p^{(n)}, \mathcal{G}_{ev}^{(n)}$	114	$\hat{J}(\varphi)$	147
G_2	14	$J_E(\varphi, \chi)$	42
G_3	68	$J_m(x)$	152
G^* reziprokes Gitter		$j_m(x)$	155
zu G		$K_t^{(1)}(\Omega)$	69
$\vec{g}$ Vektor aus G_2^*		$K(\vec{0}, r_0)$	149
H, H_α, H_∞	20, 61, 66	$\vec{k}, k_\perp$	69
H_O	227	$\vec{k}_\parallel$	14
$H_{\vec{k}}$	70	$k_\perp^{(\nu)}(E, \vec{k}_\parallel)$	90
$\hat{H}_{\vec{k}}$	75	$k(\Omega, \vec{k}_n), k$	220
$H_t^{(1)}(Z)$	22	$\kappa_{\min}(E)$	169
$H_t^{(s)}(Z)$	24, 26	$L_{ev}^{(n)}$	116
$H_t^{(s)}(F)$	40	$L_1(E, r_0)$	153
$H_t^{(1)}(\Omega)$	39	$L_p(S), L_p(Z)$	19
$H_t^{(2)}(\Omega)$	45	$L_p(\Omega)$	18
$H_{t,0}^{(1)}(\Omega)$	64	$L_2(a, b, \chi)$	27
H_b	109	$l_2^{(k)}(G_2^*), l_2(G_2^*)$	196
H_{ev}	113	$\wedge, \wedge_\alpha$	10, 39
$I(\hat{b}, b), I_{\mu\nu}$	93, 94	$\wedge_1$	24
I_μ	118	$\hat{\wedge}_{\vec{g}}$	150
Id Einheitsoperator,		$\hat{\underline{M}}$	151
Identität		$M_E, \vec{k}_E, \mathcal{M}_E, \vec{k}_E$	129

	Seite		Seite
<u>MPW</u>	167	$\mathcal{G}$	147
$\mathbb{N}$ natürliche Zahlen		$\mathcal{G}^*$	14
N_ν	94, 133	S_t	16, 68
$N_{\mathcal{Q}}$	163	$S_{E, \vec{k}_u}$	87
$N^b(E, \vec{k}_u, \vec{r})$	133	$s_n^{(\nu)}$	116
$N_{int}^{sb}(E, \vec{k}_u, z_0, l)$	136	$\text{span}(M)$ lineare Hülle	
$N^{sur}(E, \vec{k}_u, z_0)$	136	der Menge M	
$N^{ss}(E, \vec{k}_u)$	131	$\mathcal{G} \text{ i)}$ Oberflächenmaß	17
$N^{vol}(E)$	135	ii) Spektrum von H	41, 66
<u>NPW</u>	168	iii) halbe Anzahl der	118
$\vec{n}(\vec{r}), \vec{n}$	17	prop. Blochwellen	
$P_{E, \vec{k}_u}$	10	$\hat{T}, T$	22
P_L	117	$T_{\vec{g}}$	23
$P_1^m(t)$	149	$T(\vec{a}_{3u}), T, \tilde{T}(\vec{a}_{3u}), \tilde{T}$	69, 105, 106
$Q_p^{(n)}, Q_{ev}^{(n)}$	116, 117	$T(\vec{R})$	15
$\mathbb{R}$ reelle Zahlen		T_k, T_0	15, 68
$\vec{R}$ Vektor aus G_3		$\mathcal{V}_{XY}$	87
$\vec{R}$ Vektor aus G_2		$\mathcal{V}^{(n)}$	105
$R(\varphi)$	53	$T_n(\xi)$	149
$R(G)$ Wertmenge des		$t(\vec{r}), t, t_0$	17, 69
Operators G		$t_n, t_\perp$	86, 88
$R_1(E, r)$	149	$\text{tr}, \text{tr} _F$	21, 40
$\mathcal{R}_X$	87	t_{ev}	114
$\mathcal{R}^{(n)}$	105	$\mathcal{U}$	103
r_0	149	$\mathcal{U}^{(n)}$	106

	Seite		Seite
$U_R(z), U_L(z)$	32	$\ \cdot \ $ i) Operatornorm	29
V i) Volumen von Ω	70	ii) energet. Norm	57
ii) Vektorraum	28	$\langle \cdot \cdot \rangle_\Omega$	40
V_N	55,97	$\langle \cdot \cdot \rangle_Z$	25
$V_{\text{sph}}(r)$	148	$\langle \cdot \cdot \rangle_F$	40
$V(z)$	120	$(\cdot \cdot)_{k,\Omega}$	19
V_{vac}	120	$(\cdot \cdot)_{H_t^{(s)}(Z)}$	25,26
$W(s)$	35	$[\cdot, \cdot]$	43
WSZ_2	15	$(\mid)$	151
$W_2^{(k)}(\Omega), W_2^{(k)}(S)$	19	$\sim$	110
$w(\vec{r}_v, z), w$	14		
$w_{\vec{g}}(\vec{r}_n), w_{\vec{g}}$	23		
$Y_{1m}(\vec{r}^0)$	149		
$\mathbb{Z}$ ganze Zahlen			
Z	15		
$Z(r)$	158		
$\eta_{\vec{g}}$	121		
$\Theta(x)$	158		
ξ	150		
$\psi^{(\mu)}$	92		
Ω	15		
Ω_1, Ω_0	148		
$\ \cdot \ _p, \ \cdot \ _{L_p}$	19		
$\ \cdot \ _{H_t^{(s)}(Z)}$	22,25,26		

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Bross, der mich zu dieser Arbeit anregte und sie durch zahlreiche Ratschläge und hilfreiche Diskussionen förderte.

Des weiteren danke ich

- Herrn Dr. H. Stöhr für viele nützliche Tips zur Numerik und für die Überlassung der Routinen zur Behandlung des Vakuumbereiches
- Herrn E. Hahn für seine stete Diskussionsbereitschaft
- Frau L. Epp für die Anfertigung der Zeichnungen
- meiner Frau Renate für das Schreiben der Arbeit
- den ehemaligen Kollegen Dr. H.-J. Bohn, Dr. B. Schiekkel und Dr. M. Schreiber sowie allen Mitarbeitern am Lehrstuhl für die gute Zusammenarbeit.

Lebenslauf

Gerhard Wachutka geboren am 31.12.1952 in Cham/Opf. als älteres der beiden Kinder des Verwaltungsbeamten Kurt Wachutka und seiner Ehefrau Anni, geb. Zierl; seit Juni 1985 verheiratet mit Renate, geb. Haberer

1959 - 1963 Besuch der Volksschule in München

1963 - 1972 Besuch des Wilhelmsgymnasiums in München

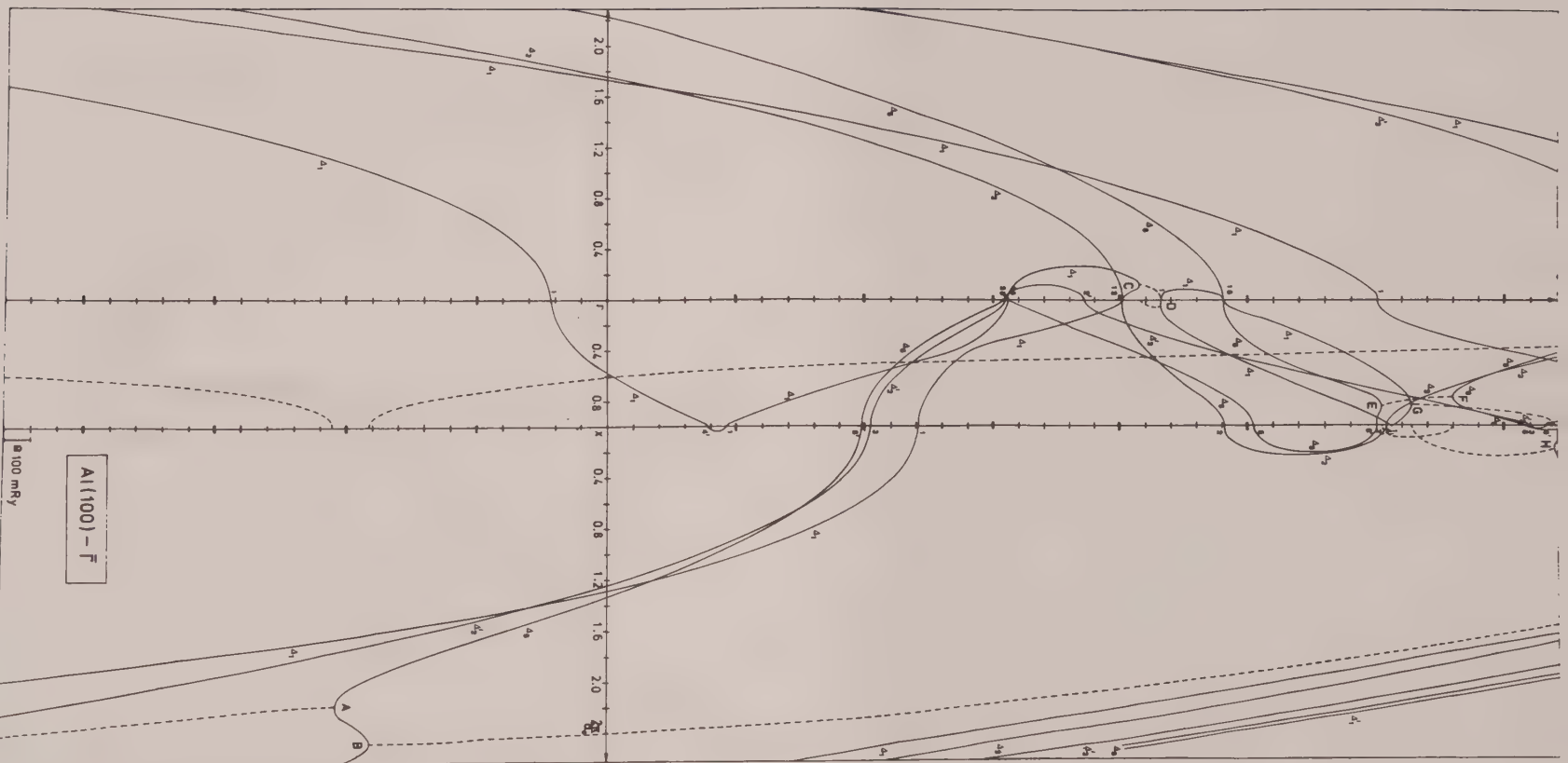
Juni 1972 Reifeprüfung

1972 - 1978 Studium der Physik an der LMU in München

Juli 1978 Diplomprüfung

1978 - 1985 Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter an der LMU München unter der Leitung von Prof. Dr. Bross und Mitwirkung bei Forschungsprojekten im Sonderforschungsbereich 128.

Fig. 6.4



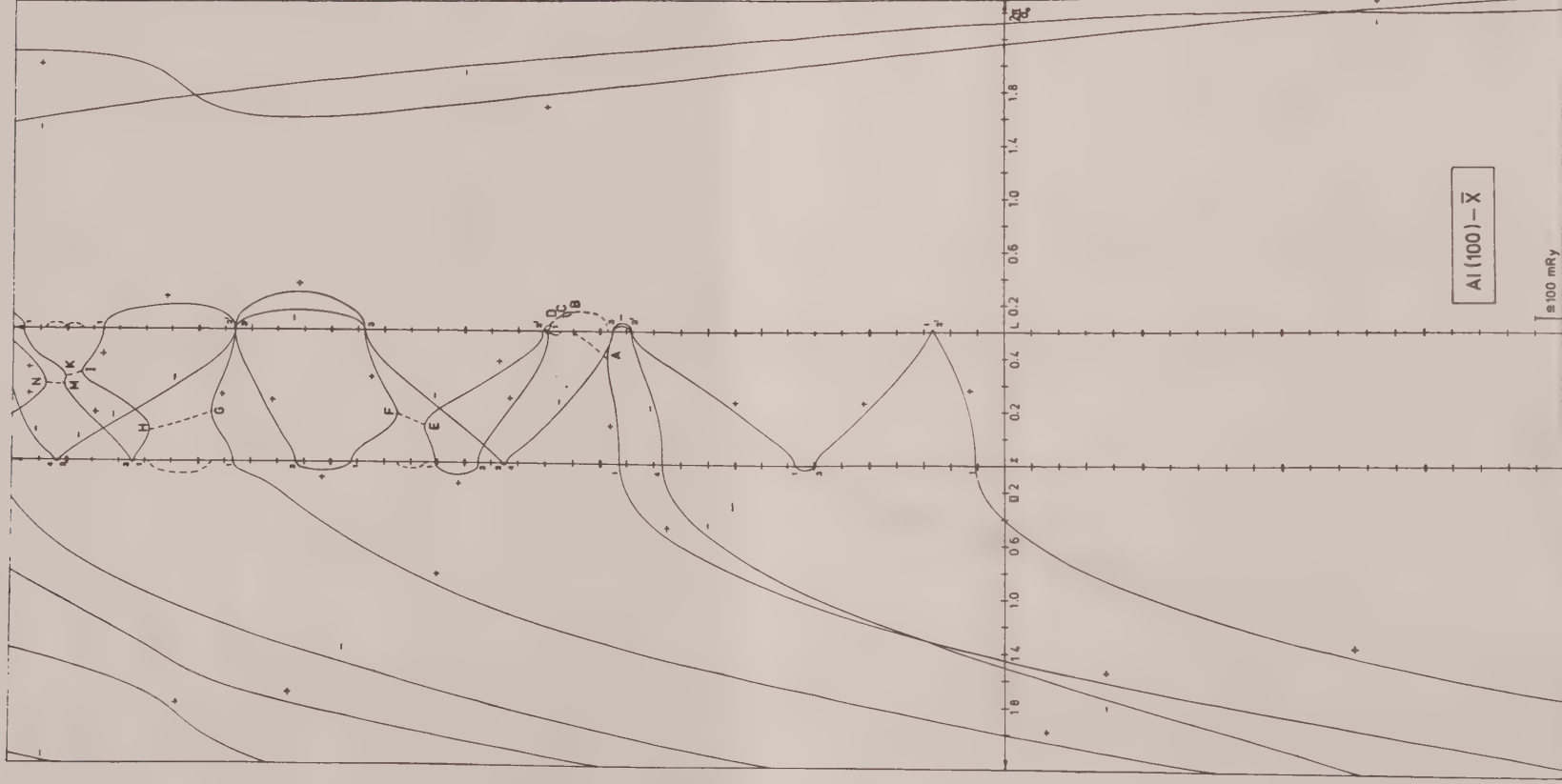


Fig. 6.5

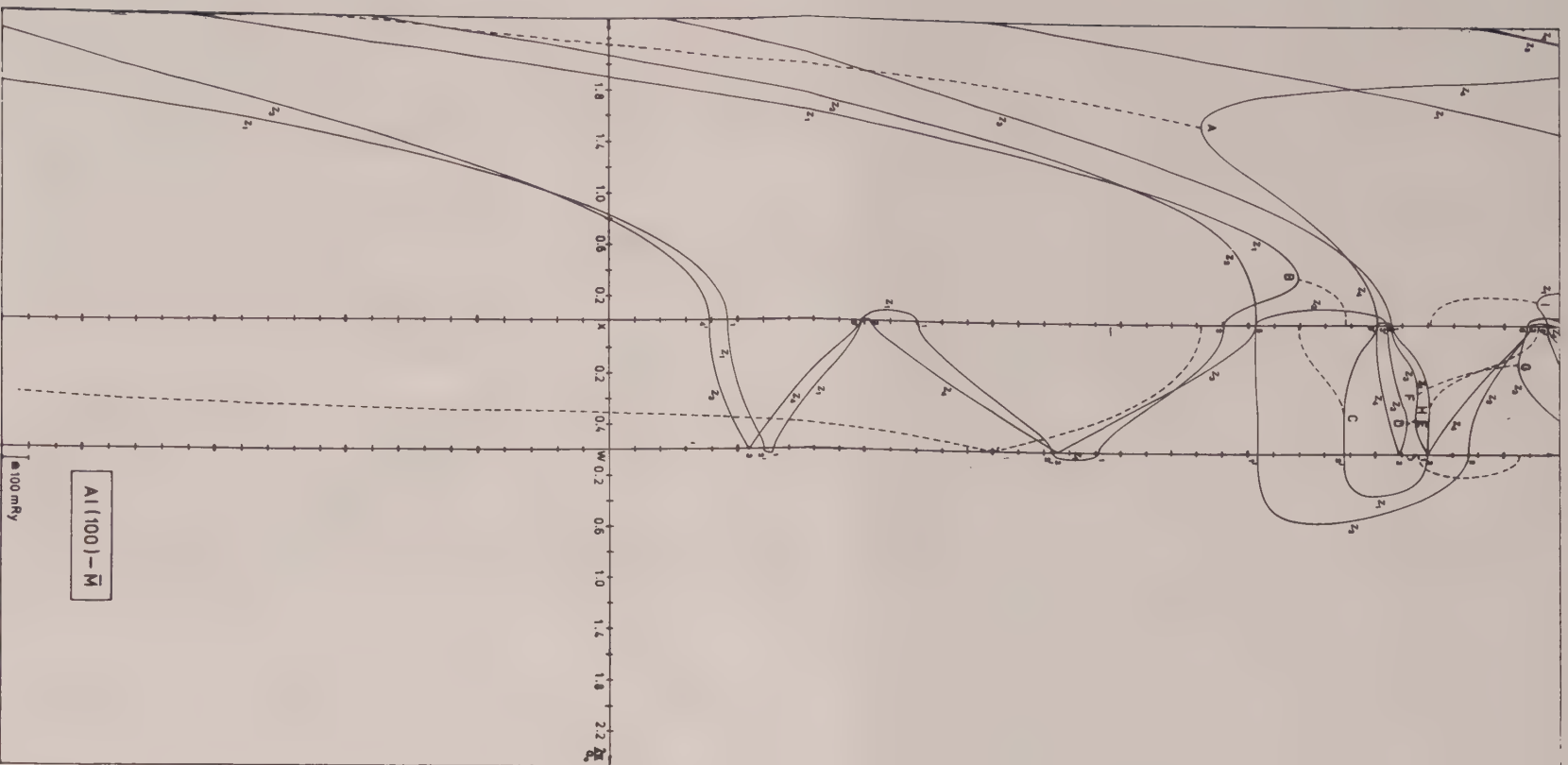


Fig. 6.6

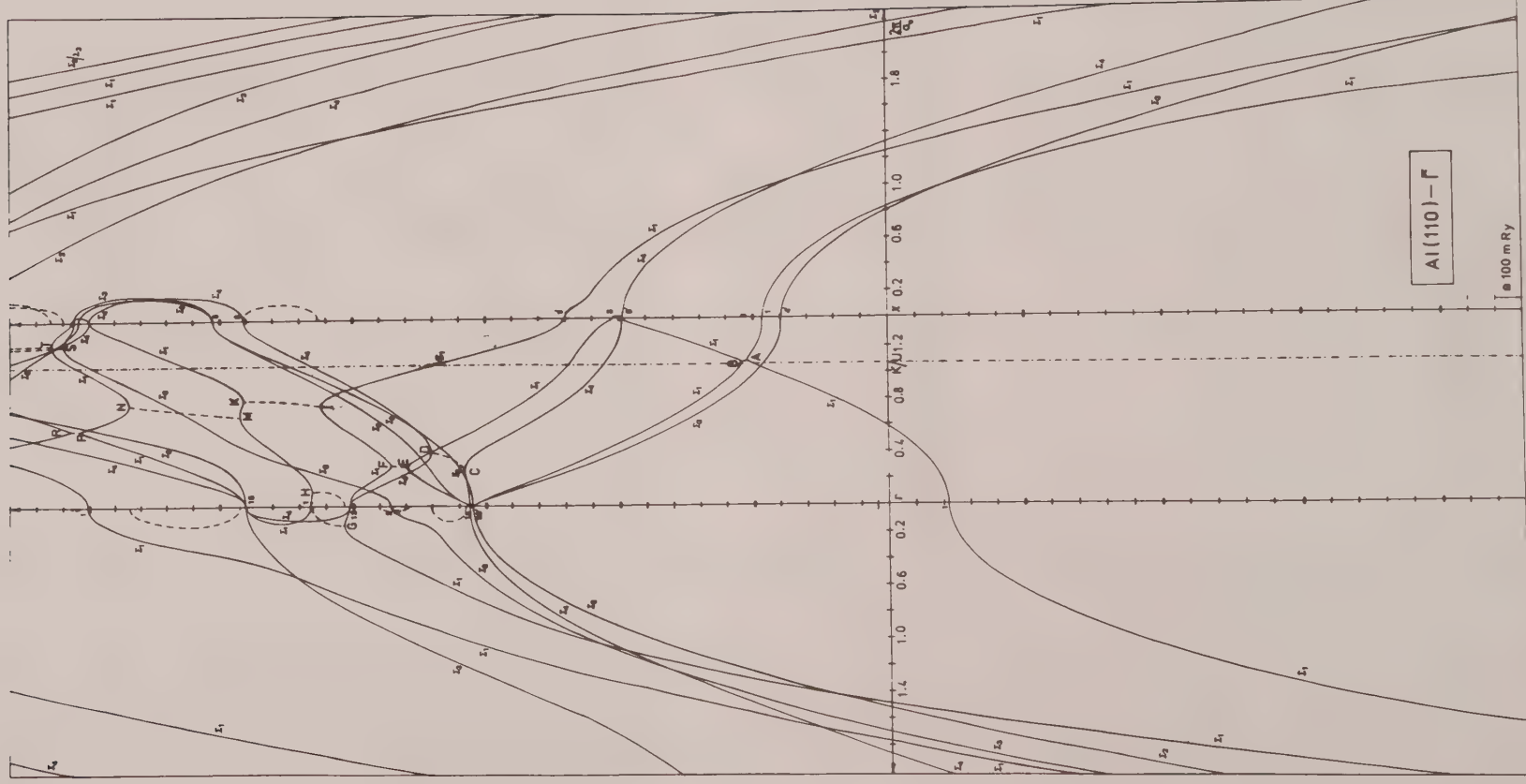
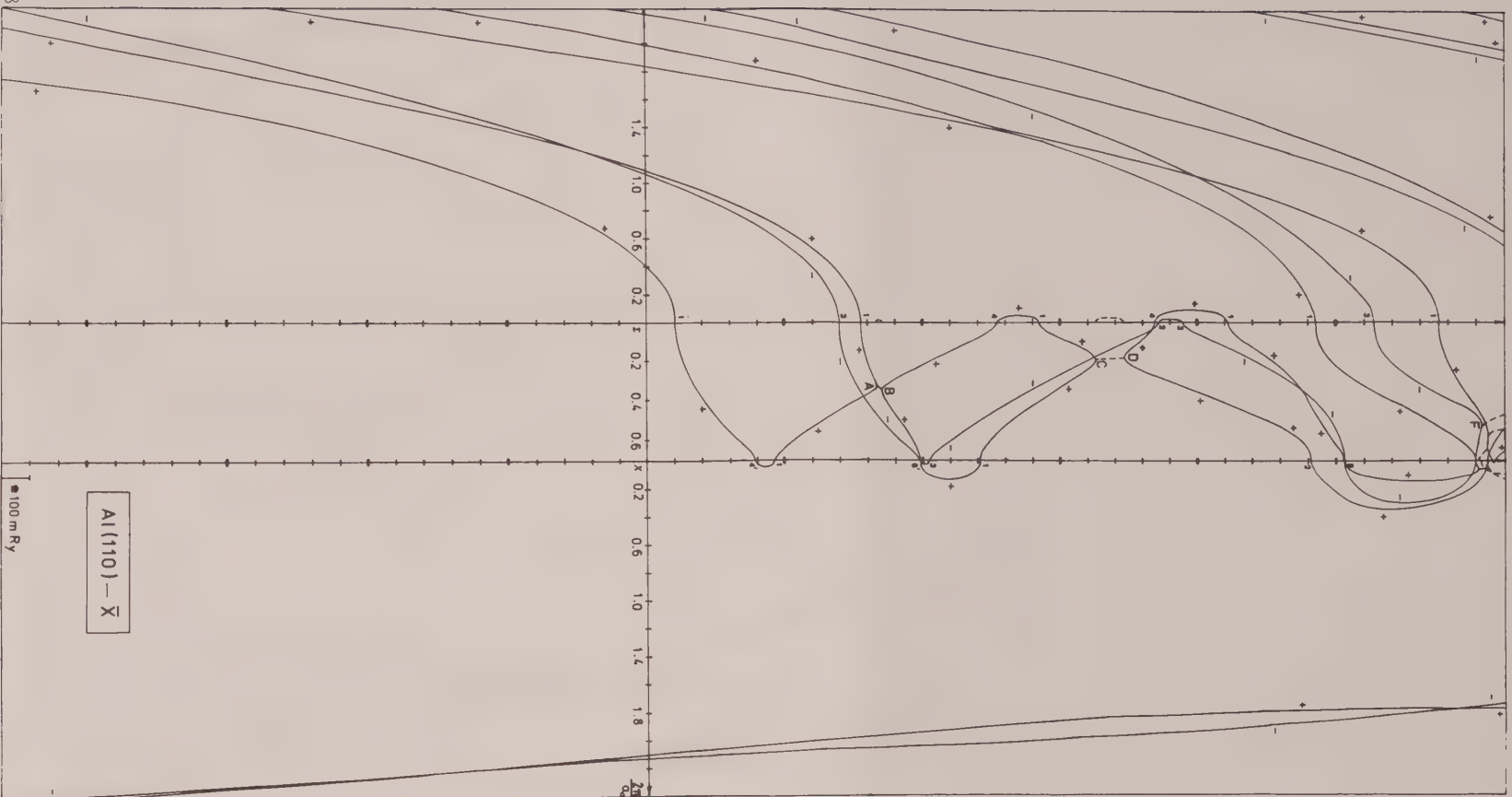


Fig. 6.7

Fig. 6.8



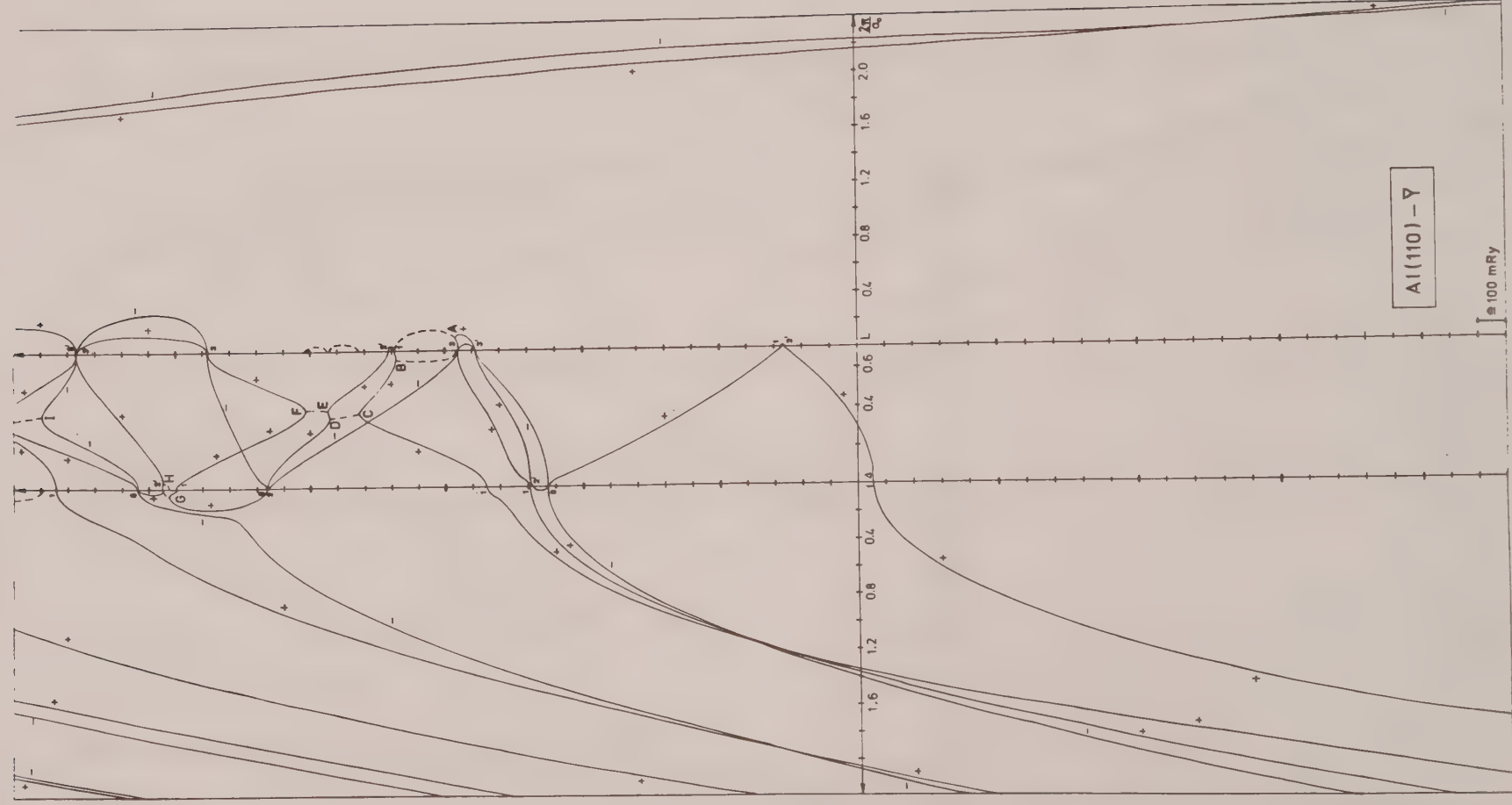


Fig. 6.9

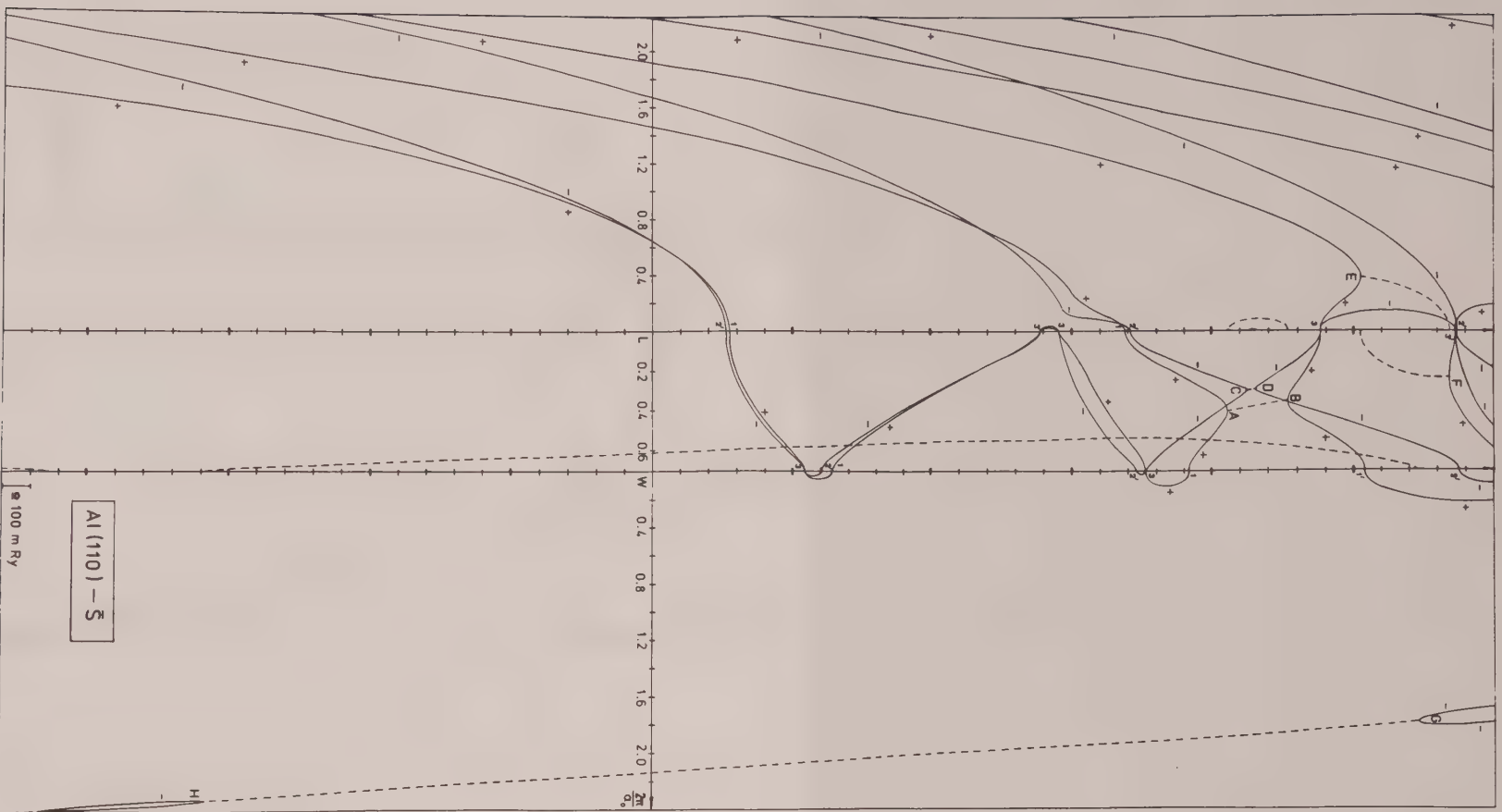


Fig. 6.10

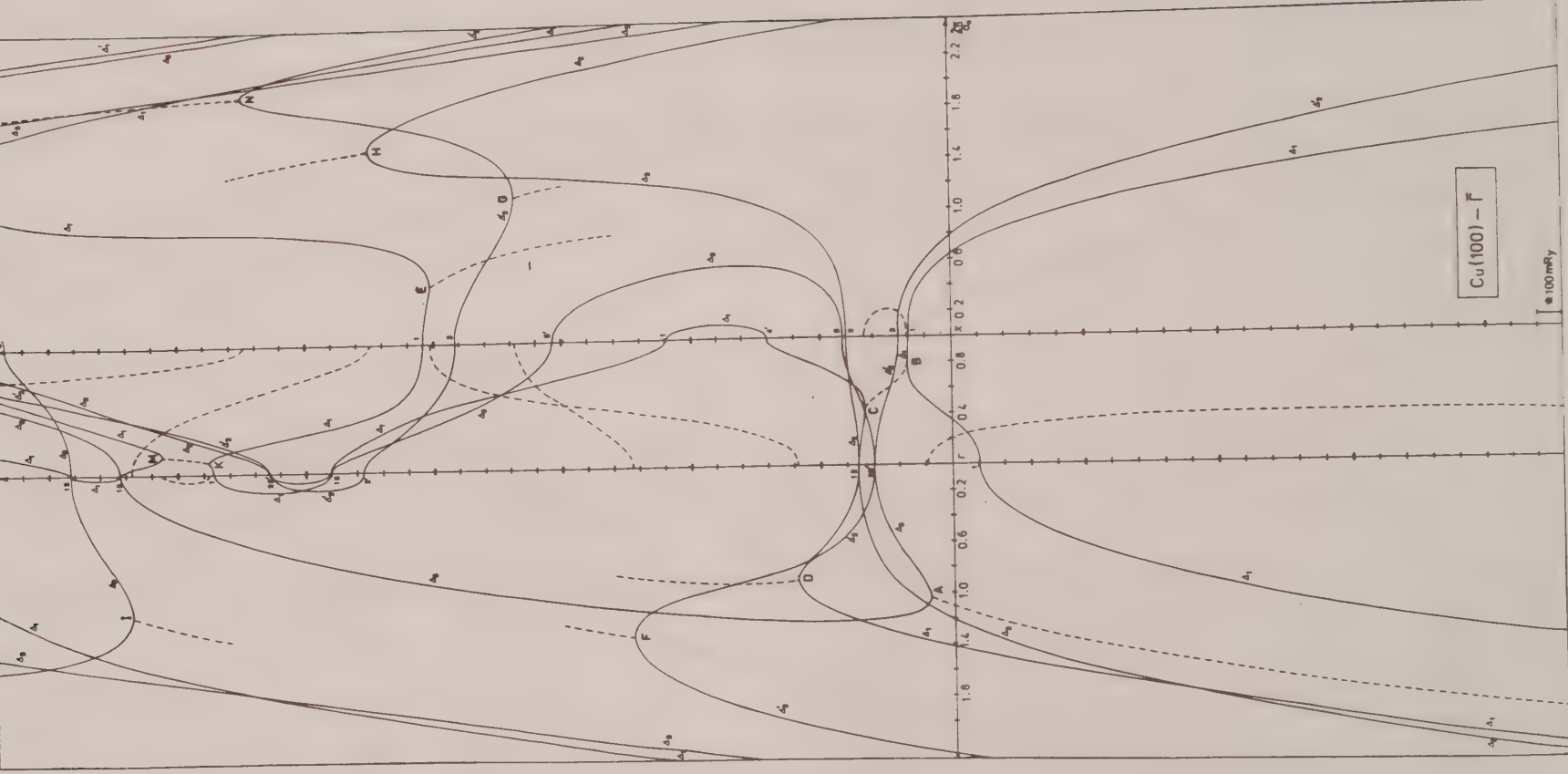


Fig. 6.11

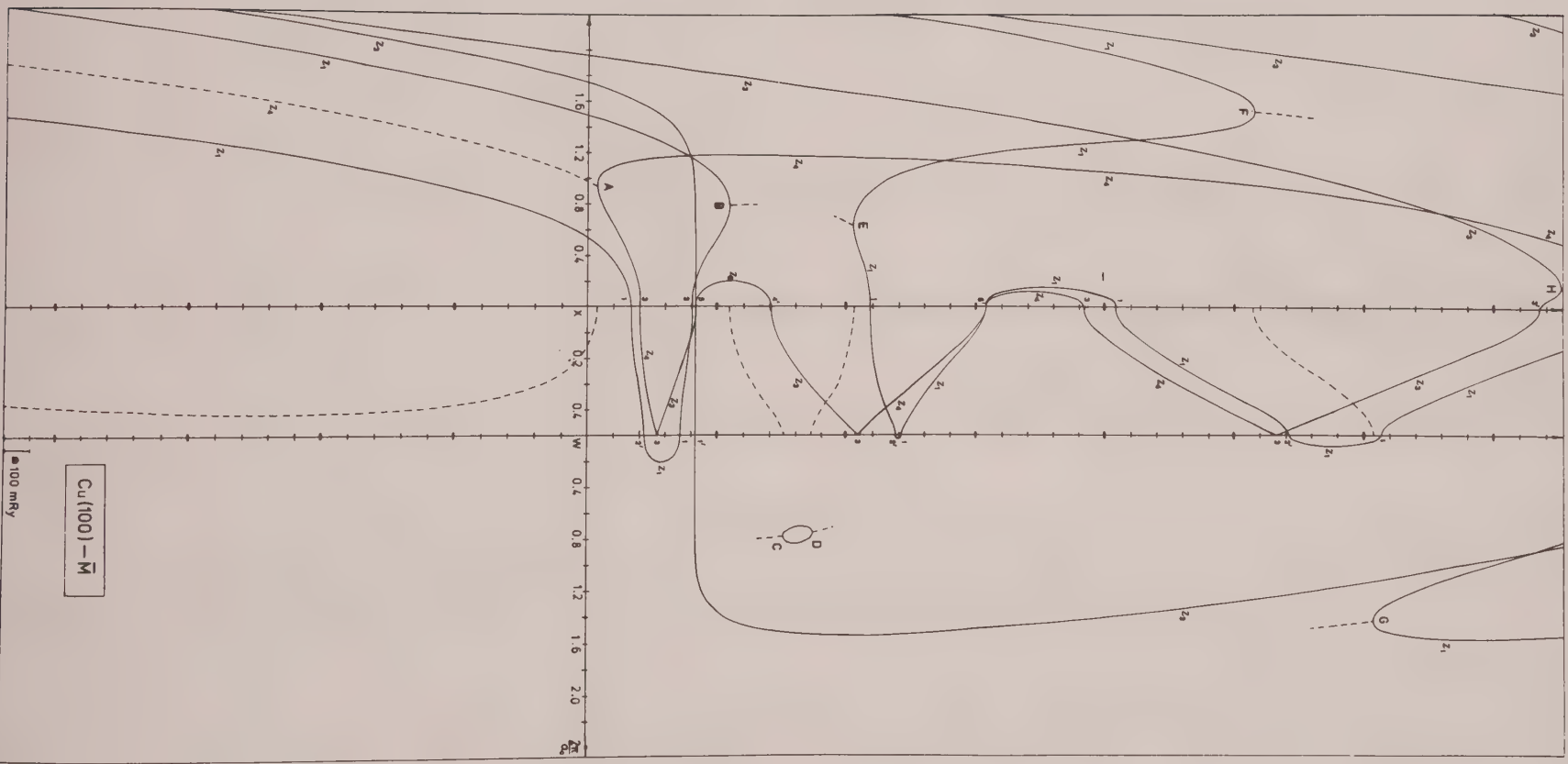


Fig. 6.13

